

**KIT**  
**Karlsruher Institut für Technologie**  
**Die Forschungsuniversität in der**  
**Helmholtz-Gemeinschaft**

**PTE-E Nr. 67**

BMUV geförderte FuE-Vorhaben zur  
„Endlagerung radioaktiver Abfälle“

Berichtszeitraum: 01. Januar – 30. Juni 2024

Projektträger Karlsruhe (PTKA)  
Entsorgung

**November 2024**

## PTE-Berichte

Der Projektträger Karlsruhe (PTKA) informiert mit Fortschrittsberichten über den aktuellen Stand der von ihm administrativ und fachlich betreuten FuE.

Die Fortschrittsberichtsreihen behandeln folgende Themenschwerpunkte:

- Endlagerung radioaktiver Abfälle  
(PTE Nr. x seit 1991, fortlaufend \*)
- Stilllegung und Rückbau kerntechnischer Anlagen  
(PTE-S Nr. x seit 2001, fortlaufend #)
- Nukleare Sicherheitsforschung  
(PTE-N Nr. x seit 2010, fortlaufend)

Die Fortschrittsberichtsreihen sind online verfügbar:

[www.ptka.kit.edu/ptka-alt/wte/287.php](http://www.ptka.kit.edu/ptka-alt/wte/287.php)

Verantwortlich für den Inhalt sind die Autoren bzw. die entsprechenden Forschungsstellen. Das KIT übernimmt keine Gewähr insbesondere für die Richtigkeit, Genauigkeit und Vollständigkeit der Angaben sowie die Beachtung privater Rechte Dritter.

*\* Bis Ende des Jahres 2011 wurde in dieser Fortschrittsberichtsreihe auch über die BMBF-geförderte FuE zur untertägigen Entsorgung chemotoxischer Abfälle informiert. Die FuE-Schwerpunkte „Untertägige Entsorgung chemotoxischer Abfälle“ und „Sicherheitsforschung für Bergbauregionen“ wurden zum 31.12.2011 beendet.*

*# Bis Ende des Jahres 2016 wurde in dieser Fortschrittsberichtsreihe auch über die BMBF-geförderte FuE zu Stilllegung und Rückbau kerntechnischer Anlagen informiert. Seit 01.10.2016 wird dieser Förderschwerpunkt durch den Projektträger GRS betreut.*

## Vorwort

Im Auftrag des Bundesministeriums für Bildung und Forschung (BMBF) und des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz, nukleare Sicherheit und Verbraucherschutz (BMUV)<sup>1</sup> arbeitet das KIT seit 1991 als Projektträger auf dem Gebiet der „nuklearen Entsorgung“.

Im Rahmen dieses Auftrages betreut der Projektträger Karlsruhe fachlich und administrativ die vom BMUV (früher BMWi – danach BMWK) geförderten FuE-Vorhaben zur Endlagerung radioaktiver Abfälle. Seit Januar 2021 ist das Projektförderprogramm „BMW-Forschungsförderung zur nuklearen Sicherheit - Projektförderprogramm des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie zur Sicherheitsforschung für kerntechnische Anlagen (2021-2025)“ Grundlage der Projektförderung.

Dieses Projektförderprogramm beinhaltet vier Forschungsgebiete: A Reaktorsicherheit, B Verlängerte Zwischenlagerung und Behandlung von hochradioaktiven Abfällen, C Endlagerung und D Querschnittsfragen, die von den Projektträgern PT-GRS und PTKA im Auftrag des BMUV betreut werden.

PTKA agiert insbesondere in den Forschungsgebieten *C Endlagerung* und *D Querschnittsfragen*, die in folgende *sechs FuE-Bereiche* aufgeteilt sind, innerhalb derer Projekte gefördert werden können:

- FuE-Bereich C1: Standortauswahl
- FuE-Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren
- FuE-Bereich C3: Sicherheitsnachweis
- FuE-Bereich D1: Wissens- und Kompetenzmanagement
- FuE-Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen
- FuE-Bereich D3: Kernmaterialüberwachung (Safeguards)

Der vorliegende Fortschrittsbericht dokumentiert Stand und Ergebnisse dieser FuE-Vorhaben aus diesen FuE-Bereichen. Er wird vom Projektträger *halbjährlich* herausgegeben, um kontinuierlich über die durchgeführten Arbeiten zu informieren.

Der Bericht ist wie folgt gegliedert:

Teil 1 listet die FuE-Vorhaben auf, die dem jeweiligen FuE-Bereich zugeordnet sind.

Teil 2, der Hauptteil, enthält die „formalisierten Zwischenberichte“ zu den FuE-Vorhaben, die nach dem Förderkennzeichen geordnet sind. Im Förderkennzeichen bedeuten die Buchstaben

- E ⇒ „Endlagerung radioaktiver Abfälle“ und
- W ⇒ „Kernmaterialüberwachung“.

Teil 3 listet die FuE-Vorhaben, zugeordnet nach der jeweiligen Forschungsstelle, auf.

---

<sup>1</sup> Die Zuständigkeit für die projektgeförderte nukleare Sicherheits- und Entsorgungsforschung wurde mit Organisationserlass vom 8.12.2021 dem BMUV übertragen.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Verzeichnis der Vorhaben gemäß FuE-Bereichen .....</b>	<b>1</b>
C	Forschungsgebiet Endlagerung .....	1
C1	Standortauswahl .....	1
C2	Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren .....	3
C3	Sicherheitsnachweis .....	8
D	Querschnittsaufgaben .....	12
D1	Wissens- und Kompetenzmanagement .....	12
D2	Sozio-technische Fragestellungen .....	13
D3	Kernmaterialüberwachung .....	15
<b>2</b>	<b>Formalisierte Zwischenberichte .....</b>	<b>16</b>
2.1	Vorhaben Bereich C1 – C3 .....	16
2.2	Vorhaben Bereich D1 – D3 .....	164
	Information zu Publikationen sowie zu Aus- und Weiterbildung .....	197
<b>3</b>	<b>Verzeichnis der Forschungsstellen .....</b>	<b>198</b>

# 1 Verzeichnis der Vorhaben gemäß FuE-Bereichen

## C Forschungsgebiet Endlagerung

### C1 Standortauswahl

<b>02 E 11829</b>	Tonsteinforschung im Felslabor Mont Terri ab Phase 25 (MonTe-25)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 31
<b>02 E 11931</b>	Einfluss der thermischen Reife auf die gekoppelten hydro-mechanischen Eigenschaften niedrig-durchlässiger Tonsteine – Feld & Laborskala (Maturity)	Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen	 76
<b>02 E 11991</b>	Entwicklung und Validation einer neuartigen Versuchstechnik für triaxiale Kriechversuche bei geringer deviatorischer Belastung (KRIECHTECH)	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	 92
<b>02 E 12052A</b>	Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt A	Helmholtz-Zentrum Dresden - Rossendorf e. V.	 113
<b>02 E 12052B</b>	Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt B	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 115
<b>02 E 12052C</b>	Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt C	Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe)	 117
<b>02 E 12062A</b>	Verbundprojekt: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe), Teilprojekt A: Ungewissheiten durch Materialparameter, Diskretisierung, Initial- und Randbedingungen	Technische Universität Darmstadt	 119

<b>02 E 12062B</b>	Verbundprojekt: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe), Teilprojekt B: Bayesischer Ansatz zur Kalibrierung geomechanisch- numerischer Modelle mit Reduzierung von Ungewissheiten	Helmholtz-Zentrum Potsdam Deutsches GeoForschungsZentrum GFZ	 121
<b>02 E 12062C</b>	Verbundprojekt: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe), Teilprojekt C: Ungewissheiten durch geometrische Parameter, Erstellung von Ersatzmodellen durch Methoden der künstlichen Intelligenz	Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen	 123

**C2 Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren**

<b>02 E 11577A</b>	Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt A	BGE Technology GmbH, Peine	 19
<b>02 E 11577B</b>	Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt B	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 21
<b>02 E 11627</b>	Arteigene Versatz- und Verschlussmaterialien für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Tonformationen (AVET)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 23
<b>02 E 11698</b>	Untersuchung thermisch- hydraulisch-mechanisch- chemischer Einwirkungen auf zementbasierte Dichtelemente (THYMECZ)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 27
<b>02 E 11819</b>	Mineralumwandlung und Sorption bei erhöhten Temperaturen in geklüfteten Kristallingesteinen und Barrierematerial (MUSE)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 29
<b>02 E 11870A</b>	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 50
<b>02 E 11870B</b>	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt B	Helmholtz-Zentrum Dresden- Rossendorf e. V., Dresden	 52
<b>02 E 11870C</b>	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt C	Universität Greifswald	 54
<b>02 E 11870D</b>	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt D	TU München	 56
<b>02 E 11870E</b>	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in	Leibniz Universität Hannover	 58

	Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt E		
<b>02 E 11870F</b>	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt F	Leibniz Universität Hannover	 60
<b>02 E 11880</b>	Sicherheitsrelevante Untersuchungen zur Bentonitaufsättigung (SIRUB)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 62
<b>02 E 11911A</b>	Verbundprojekt: Vorhersage der heterogenen Radionuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in granitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt A	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden	 68
<b>02 E 11911B</b>	Verbundprojekt: Vorhersage der heterogenen Radionuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in granitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt B	Friedrich-Schiller-Universität Jena	 70
<b>02 E 11921A</b>	Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEPARation von AMericiuM aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt A	Forschungszentrum Jülich GmbH	 72
<b>02 E 11921B</b>	Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEPARation von AMericiuM aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt B	Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe), Eggenstein-Leopoldshafen	 74
<b>02 E 11971A</b>	Verbundprojekt: Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschnmelzen für Verschlussmaßnahmen von Endlagern für radioaktiver Abfälle im Wirtsgestein Salz (SalVE), Teilprojekt A	Technische Universität Bergakademie Freiberg	 82
<b>02 E 11971B</b>	Verbundprojekt: Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschnmelzen für Verschlussmaßnahmen von Endlagern für radioaktiver Abfälle	BGE Technology GmbH, Peine	 84

	im Wirtsgestein Salz (SaIVE), Teilprojekt B		
<b>02 E 12001A</b>	Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH- SP1), Teilprojekt A	Karlsruher Institut für Technologie (KIT)	 94
<b>02 E 12001B</b>	Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH- SP1), Teilprojekt B	Ruhr-Universität Bochum	 96
<b>02 E 12072A</b>	Verbundprojekt: MgO-Beton C3 als langzeitbeständiges und schnellwirksames Verschlusselement für Schachtverschlüsse zukünftiger HAW-Endlager im Salinar (MgO- C3), Teilprojekt A	Technische Universität Bergakademie Freiberg	 125
<b>02 E 12072B</b>	Verbundprojekt: MgO-Beton C3 als langzeitbeständiges und schnellwirksames Verschlusselement für Schachtverschlüsse zukünftiger HAW-Endlager im Salinar (MgO- C3), Teilprojekt B	Helmholtz-Zentrum Dresden - Rossendorf e. V	 127
<b>02 E 12092</b>	Recherche und Beschreibung für das Endlagerbehältersystem in Frage kommende Materialien (ElaBeMa)	Leibniz Universität Hannover	 131
<b>02 E 12102</b>	Entwicklung einer selbstlernenden Modellierungsmethodik zu geomechanischen und geotechnischen Prozessen am Beispiel der Planungs- und Auffahrungsphase einer Einlagerungsstrecke eines Tiefenlagers (SEMOTI)	Technische Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig	 133
<b>02 E 12122A</b>	Verbundprojekt: Stabilität von Mineralphasen des Eisens im Nahfeld eines Endlagers (STAMINA), Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 140
<b>02 E 12122B</b>	Verbundprojekt: Stabilität von Mineralphasen des Eisens im Nahfeld eines Endlagers (STAMINA), Teilprojekt B	Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe)	 142

<b>02 E 12133A</b>	Verbundprojekt: Weiterführung der Entwicklung von Ausbau von Grubenbauen für ein HAW-Endlager in Tongestein (AGEnT002), Teilprojekt A	BGE TECHNOLOGY GmbH	 144
<b>02 E 12133B</b>	Verbundprojekt: Weiterführung der Entwicklung von Ausbau von Grubenbauen für ein HAW-Endlager in Tongestein (AGEnT002), Teilprojekt B	DMT GmbH & Co. KG	 146
<b>02 E 12143</b>	Feinerkundung der Steinsalzkontur im Bereich zukünftiger Verschlussbauwerke in HAW-Endlagern durch in situ Raman-Spektroskopie (SaRa)	Technische Universität Bergakademie Freiberg	 148
<b>02 E 12153A</b>	Verbundprojekt: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern (EVIDENT), Teilprojekt A	Friedrich-Schiller-Universität Jena	 150
<b>02 E 12153B</b>	Verbundprojekt: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern (EVIDENT), Teilprojekt B	Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe)	 152
<b>02 E 12153C</b>	Verbundprojekt: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern (EVIDENT), Teilprojekt C	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 154
<b>02 E 12163A</b>	Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt A	Karlsruher Institut für Technologie (Universitätsaufgabe)	 156
<b>02 E 12163B</b>	Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt B	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 158
<b>02 E 12163C</b>	Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip -	Technische Universität Bergakademie Freiberg	 160

	Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt C		
<b>02 E 12173</b>	Entwicklung eines salzgrusbasierten Versatzkonzepts unter der Option Rückholbarkeit - Phase 2 (SAVER II)	Technische Universität Bergakademie Freiberg	 162

### C3 Sicherheitsnachweis

<b>02 E 11466</b>	Entwicklung von Rechenmodulen für die integrierte Modellierung von Transportprozessen im einschlusswirksamen Gebirgsbereich (RepoTREND+)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 17
<b>02 E 11668A</b>	Verbundprojekt: Smart-K <sub>d</sub> in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (SMILE), Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 25
<b>02 E 11860A</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt A	Johannes Gutenberg-Universität Mainz	 33
<b>02 E 11860B</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt B	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V.	 35
<b>02 E 11860C</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt C	Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe), Eggenstein-Leopoldshafen	 37
<b>02 E 11860D</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt D	Universität des Saarlandes	 39
<b>02 E 11860E</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt E	TU München	 42
<b>02 E 11860F</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt F	Universität Potsdam	 44
<b>02 E 11860G</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt G	TU Dresden	 46
<b>02 E 11860H</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt H	Universität Heidelberg	 48

<b>02 E 11890A</b>	Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt A	BGE Technology GmbH, Peine	 64
<b>02 E 11890B</b>	Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt B	Technische Universität Bergakademie Freiberg	 66
<b>02 E 11941</b>	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern (WiGru-9)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 79
<b>02 E 11981A</b>	Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 86
<b>02 E 11981B</b>	Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt B	Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe), Eggenstein-Leopoldshafen	 88
<b>02 E 11981C</b>	Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt C	Leibniz Universität Hannover	 90
<b>02 E 12012A</b>	Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d <sup>3f++</sup> : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE II), Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 98
<b>02 E 12012B</b>	Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d <sup>3f++</sup> : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE II), Teilprojekt B	Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main	 100

<b>02 E 12022A</b>	Verbundprojekt: Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH <sup>2</sup> M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen - Erweiterung auf multiphysikalische Ansätze und mehrdimensionale Modellgeometrien (BenVaSim II), Teilprojekt A	Technische Universität Clausthal	 103
<b>02 E 12022B</b>	Verbundprojekt: Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH <sup>2</sup> M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen - Erweiterung auf multiphysikalische Ansätze und mehrdimensionale Modellgeometrien (BenVaSim II), Teilprojekt B	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 105
<b>02 E 12032</b>	Methoden zur experimentellen und numerischen Analyse der geologischen Barriere eines Endlagers in tonreichen Sedimentgesteinsformationen (MAGNUS)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 107
<b>02 E 12042A</b>	Verbundprojekt: Erarbeitung einer Methodik zur systematischen Ableitung von zu erwartenden und abweichenden Entwicklungen im Kristallingestein in Deutschland und exemplarische Anwendung als Grundlage zur Bewertung des sicheren Einschlusses unter Berücksichtigung von Optimierungsmaßnahmen (CHRISTA III), Teilpr. A	BGE TECHNOLOGY GmbH	 109
<b>02 E 12042B</b>	Verbundprojekt: Erarbeitung einer Methodik zur systematischen Ableitung von zu erwartenden und abweichenden Entwicklungen im Kristallingestein in Deutschland und exemplarische Anwendung als Grundlage zur Bewertung des sicheren Einschlusses unter Berücksichtigung von Optimierungsmaßnahmen (CHRISTA III), Teilpr. B	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 111

<b>02 E 12082</b>	Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken - Durchführung, Auswertung und Reanalyse von THM-Versuchen unter triaxialer Extensionsbeanspruchung (SSBVIER)	Technische Universität Clausthal	 129
<b>02 E 12112A</b>	Verbundprojekt: Systematic sensitivity analysis for mechanistic geochemical models using field data from crystalline rock (SANGUR), Teilprojekt A	Helmholtz-Zentrum Dresden - Rossendorf e. V.	 136
<b>02 E 12112B</b>	Verbundprojekt: Systematic sensitivity analysis for mechanistic geochemical models using field data from crystalline rock (SANGUR), Teilprojekt B	Technische Universität Clausthal	 138

**D Querschnittsaufgaben**

**D1 Wissens- und Kompetenzmanagement**

**D2 Sozio-technische Fragestellungen**

<b>02 E 11849A</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt A	<b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>	 165
<b>02 E 11849B</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt B	<b>Christian-Albrechts-Universität zu Kiel</b>	 169
<b>02 E 11849C</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt C	<b>Freie Universität Berlin</b>	 172
<b>02 E 11849D</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt D	<b>Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe), Eggenstein-Leopoldshafen</b>	 174
<b>02 E 11849E</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt E	<b>Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe), Eggenstein-Leopoldshafen</b>	 177
<b>02 E 11849F</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt F	<b>Leibniz Universität Hannover</b>	 181
<b>02 E 11849G</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt G	<b>Öko-Institut. Institut für angewandte Ökologie e. V.</b>	 184
<b>02 E 11849H</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt H	<b>TU Berlin</b>	 186
<b>02 E 11849I</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in	<b>TU Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig</b>	 188

	Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt I		
<b>02 E 11849J</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt J	<b>Universität Kassel</b>	 190

**D3 Kernmaterialüberwachung**

<b>02 W 6279</b>	Neu- und Weiterentwicklung von Konzepten, Methoden und Techniken für die internationale Kernmaterialüberwachung, insbesondere im Rahmen der nuklearen Entsorgung (SAFEGUARDS-3)	<b>Forschungszentrum Jülich</b>	 192
<b>02 W 6281</b>	Antineutrino-Detektion zur Überwachung radioaktiver Abfälle (NU-SAFEGUARDS)	<b>Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen</b>	 194

## **2 Formalisierte Zwischenberichte**

### **2.1 Vorhaben Bereich C1 – C3**

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11466</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> RepoTREND+: Entwicklung von Rechenmodulen für die integrierte Modellierung von Transportprozessen im einschlusswirksamen Gebirgsbereich			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2016 bis 31.10.2024		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 3.466.655,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Reiche, Tatiana	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Inhalt dieses FuE-Vorhabens ist die Entwicklung eines Rechenmoduls für das Programmpaket RepoTREND zur Simulation von Prozessen im Nahfeld eines Endlagersystems. Dabei muss die dem Nahfeldmodul zugrunde liegende Softwarearchitektur (sie definiert die grundlegenden Komponenten eines Softwaresystems und beschreibt die Zusammenhänge, die zwischen den Komponenten bestehen) vor allem eine hohe Modularität der Programmstruktur und eine hohe Flexibilität gegenüber neuen Anforderungen aufweisen, um eine einfache Modifikation und Erweiterung des Programmcodes zu gewährleisten. Die Entwicklung einer Softwarearchitektur mit den genannten Hauptmerkmalen ist eine Voraussetzung für den Erfolg des gesamten Projekts und beeinflusst maßgeblich den erforderlichen Aufwand für die Entwicklung des Programmcodes. Die Erstellung relevanter Softwarearchitektur gilt deswegen als das wichtigste Teilziel des Projekts.

Die Arbeiten dienen als Grundlage für die Durchführung von Modellrechnungen zur integrierten Analyse der Langzeitsicherheit in zahlreichen aktuellen und zukünftigen Projekten.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Arbeitsprogramm gliedert sich in sechs Arbeitspakete:

Arbeitspaket 1: Anforderungsanalyse und Wissensmanagement. Anforderungen werden ermittelt, spezifiziert, analysiert, strukturiert, abgestimmt und bewertet. Das Wissensmanagement umfasst sowohl interne Maßnahmen (wie Know-How-Transfer durch interne Diskussionsrunden) als auch das Einbeziehen des Know-Hows von externen Experten (z. B. durch die Teilnahme an fachlichen Konferenzen).

Arbeitspaket 2: Vorarbeiten für die Codeentwicklung. Neue Konzepte und Modelle müssen erstellt werden: konzeptionelles, mathematisches und numerisches Modell des Nahfeldmoduls, Entwurf der Softwarearchitektur, Entwurf einzelner Programmkomponenten, Optimierungskonzepte.

Arbeitspaket 3: Codeentwicklung. Umsetzung der in AP2 erarbeiteten Konzepte in einen Programmcode.

Arbeitspaket 4: Test, Qualitätssicherung, Dokumentation. Umfangreiche Tests werden in allen Programmentwicklungsphasen durchgeführt. Die folgenden QS-Maßnahmen werden umgesetzt: Standardisierung der Arbeitsprozesse, Versions- und

Konfigurationsmanagement, Release-Freigabe, Bugtracking, Lokalisierung von Problemen, Programmkommentare, Konventionen, Review des Programmcodes. Die gesamte Entwicklung über alle Phasen wird ausführlich dokumentiert.

Arbeitspaket 5: Verfolgung von Anforderungen aus aktuell laufenden FuE-Projekten. Die Anforderungen aus den aktuell laufenden FuE-Projekten werden aufgenommen und so weit analysiert, dass eine Entscheidung getroffen werden kann, ob eine Anforderung bei der aktuellen Entwicklung berücksichtigt werden kann oder später, im Rahmen eines separaten Projekts bzw. Arbeitspakets, realisiert werden soll.

Arbeitspaket 6: Berichte zum Projektfortschritt. Alle durchgeführten Arbeiten und erzielten Ergebnisse werden in Halbjahres- und Jahresberichten sowie im Abschlussbericht dokumentiert.

### **3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse**

#### *Arbeitspaket 1*

Zur Erweiterung des Kenntnisstands auf dem Gebiet der Strömungs- und Transportprozesse in porösen Medien wurde an der internationalen Konferenz InterPore 2024 vom 13.05. bis 16.05. (in Qingdao, China) teilgenommen. Auf der Konferenz wurde der aktuelle Stand von RepoTREND vorgestellt.

#### *Arbeitspaket 2*

Die Struktur der XENIA-Module, die für die Definition eines Nahfeld-Rechenlaufs aufgebaut wurde, wurde analysiert und überarbeitet, um die Benutzerfreundlichkeit zu erhöhen und die Eingabe der Parameter intuitiver zu machen. Der Programmcode wurde entsprechend angepasst.

#### *Arbeitspaket 4*

Zum Validieren von NaTREND soll ein konzeptuell einfaches und möglichst gut kontrollierbares Experiment im geotechnischen Labor durchgeführt werden. Das Prinzip einer Versuchszelle wurde entwickelt. Die für die Versuche gebaute Messzelle musste jedoch aufgrund von beim Zusammenbau auftretenden Deformationen überarbeitet werden. Während der Probenpräparation traten außerdem unerwartete Schwierigkeiten auf, eine homogene Einbaudichte zu erreichen. Nach der Optimierung dieser Prozesse konnte ein erster Versuch erfolgreich durchgeführt werden. Auf dieser Basis sollen nun Wiederholungsversuche durchgeführt werden, um die Ergebnisse und damit die Methodik zu bestätigen.

Es wurden Testrechnungen zum Radionuklidtransport konzipiert und durchgeführt.

Im Rahmen der Pflege des Rechencodes wurde umfangreiches Refactoring durchgeführt. Dabei wurden auch neue C++-Funktionalitäten integriert, die die Performance des Rechencodes wesentlich verbessern sollen.

#### *Arbeitspaket 6*

Der vorliegende Bericht wurde erstellt. Am Abschlussbericht wurde gearbeitet.

### **4. Geplante weitere Arbeiten**

Im nächsten Halbjahr soll überwiegend an AP4 gearbeitet werden, wobei der Schwerpunkt bei dem Testen, bei der Durchführung des geplanten Laborversuchs und beim Verfassen des umfassenden Abschlussberichts liegen soll.

### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Tatiana Reiche: *RepoTREND*: Software Tools for Robust Safety Analysis of Radioactive Waste Repositories, 13.-16. Mai, 2024, Qingdao (China).

<b>Auftragnehmer:</b> BGE TECHNOLOGY GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11577A	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE)			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung C2.3 Geotechnische und technische Barrieren			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2017 bis 31.05.2024		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 31.05.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.502.960,74 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Christian Müller	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Grundlage des Projektes SUSE ist die 2001 zwischen dem früheren russischen Ministerium für Atomenergie Minatom (jetzt Rosatom) und dem BMWi getroffene Vereinbarung für eine deutsch-russische Kooperation zur internationalen Forschungs- und Entwicklungsarbeit hinsichtlich der Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Kristallingesteinen. In den vergangenen 15 Jahren wurden gemeinsame Forschungs- und Entwicklungsarbeiten, die sich auf die Ergebnisse von Erkundungsarbeiten auf mehreren Kristallinstandorten im Nishnekansker Gebiet (nahe Krasnojarsk) stützen und sich seit 2006 auf Untersuchungen des Standortes Yeniseysky konzentrieren, durchgeführt. Im Vorhaben SUSE werden die sicherheitsanalytischen Untersuchungen zu Endlagersystemen in Kristallingesteinen am Standort Yeniseysky weitergeführt. Die Untersuchungen umfassen die Erarbeitung von Verschlusskonzepten, der Charakterisierung der Klüftung kristalliner Gesteine sowie die Durchführung hydrogeologischer Strömungs- und Transportberechnungen. In Abstimmung mit den russischen Kollegen werden zudem Laborexperimente zu den mechanischen Eigenschaften an geklüfteten, wieder mineralisierten Wirtsgesteinen sowie zum Radionuklid-Rückhaltevermögen an kristallinen Kernproben aus dem Untersuchungsgebiet durchgeführt. Aufbauend auf diesen Ergebnissen wird das geologische Standortmodell für das Untersuchungsgebiet Yeniseysky aktualisiert und hinsichtlich des Kluff- und Störungzonennetzwerkes präzisiert.

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP 1: Bemessung des geotechnischen Verschlussystems
- AP 2: Gesteinseignungsklassifikationen als Positionierungskriterien für Dichtelemente, Bohrlöcher und Auffahrungen im Kristallin
- AP 3: Charakterisierung eines Kluff- und Störungzonennetzwerkes am Beispiel des Standortes Yeniseysky
- AP 4: Erhebung zusätzlicher Daten an Probenmaterial aus dem Gebiet Yeniseysky
- AP 5: Regionale 3D-Strömungs- und Transportmodelle
- AP 6: Bewertung und Dokumentation
- AP 7: Unterstützung bei der methodischen Planung des Untertagelabors und Spezifizierung des In-Situ-Forschungs- und Entwicklungsbedarfs

### **3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse**

Im Berichtszeitraum wurde intensiv an der Auswertung der arbeitspaketspezifischen Ergebnisse gearbeitet. Diese wurden in Form eines Abschlussberichtes dokumentiert. Das Projekt endete zum 31.05.2024.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

-

### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

-

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11577B	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE)			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2017 bis 31.05.2024		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 31.05.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 2.061.288,00 EUR		<b>Projektleiterin:</b> Dr. Judith Flügge	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Im Vorhaben SUSE werden die sicherheitsanalytischen Untersuchungen zu Endlagersystemen in Kristallingesteinen am Standort Jenessieskij weitergeführt. Die Untersuchungen umfassen die Erarbeitung von Verschlusskonzepten, der Charakterisierung der Klüftung kristalliner Gesteine sowie die Durchführung hydrogeologischer Strömungs- und Transportberechnungen. In Abstimmung mit den russischen Kollegen werden zudem Laborexperimente zu den mechanischen Eigenschaften an geklüfteten, wieder mineralisierten Wirtsgesteinen sowie zum Radionuklid-Rückhaltevermögen an kristallinen Kernproben (Gneiss, Dolerit, Kluftminerale) aus dem Untersuchungsgebiet Yeniseysky in Russland durchgeführt. Aufbauend auf diesen Ergebnissen wird das geologische Standortmodell für das Untersuchungsgebiet Yeniseysky aktualisiert und hinsichtlich des Kluft- und Störungszonennetzwerkes präzisiert. Auf dieser Grundlage werden mit den Programmen d<sup>3f++</sup> und RepoTREND Strömungs- bzw. Transportmodelle aufgebaut und Berechnungen durchgeführt.

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Vorhabens werden folgende Arbeitspakete bearbeitet:

AP 1: Bemessung des geotechnischen Verschlussystems

AP 2: Gesteinseignungsklassifikationen als Positionierungskriterien für Dichtelemente, Bohrlöcher und Auffahrungen im Kristallin

AP 3: Charakterisierung eines Kluft- und Störungszonennetzwerkes am Beispiel des Standortes Yeniseysky

AP 4: Erhebung zusätzlicher Daten an Probenmaterial aus dem Gebiet Yeniseysky

AP 5: Regionale 3D-Strömungs- und Transportmodelle

AP 6: Bewertung und Dokumentation

AP 7: Unterstützung bei der methodischen Planung des Untertagelabors und Spezifizierung des In-situ-Forschungs- und Entwicklungsbedarfs

Die GRS ist federführend in den AP 4 und AP 5.

### **3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse**

Zur Diskussion der Ergebnisse und zur Absprache der weiteren Arbeiten wurden am 23.02.2024, 19.03.2024, 17.05.2024 und 30.05.2024 Arbeitstreffen der Verbundpartner per Videokonferenz, v. a. zur Diskussion der Ergebnisse aus AP3 und AP5 und zum Abschlussbericht, durchgeführt.

AP 4: Die ICP-OES- und ICP-MS-Analysen der Extraktionen mit 0,1 M und 6 M HCl des Auslaugungsversuchs mit zwei kalzitischen Klufftmineralisationen und zwei angrenzenden Alterationszonen (im Migmatit) aus dem UTL Bukov und die Auswertungen der Ergebnisse wurden durchgeführt. Die im AP 4 geplanten experimentellen Arbeiten wurden somit abgeschlossen.

AP 5: In jedem Rechenfall wurde zur Qualifikation der Unterschiede zwischen den Berechnungen der Grundwasserströmung zwischen  $d^{3f++}$  und OGS die Abflussrate jedes einzelnen Modells ausgewertet. Außerdem wurden die relativen Fehler berechnet. Für die Rechenfälle 2 und 3 wurden Druck- und Konzentrationsverteilungen in den verschiedenen Modellen verglichen. Darüber hinaus wurde der Druckgradient entlang eines ausgewählten Profils verglichen. Weiterhin wurden die Vor- und Nachteile der verschiedenen Modellansätze für die Darstellung von Klüften diskutiert.

AP6: Der Abschlussbericht wird erstellt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP 6: Fertigstellung des Abschlussberichts

### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

- keine

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11627	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Arteigene Versatz- und Verschlussmaterialien für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Tonformationen (AVET)			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2017 bis 31.05. 2024		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 31.05.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.813.589,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr.-Ing. Chun-Liang Zhang	

### 1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben zur Untersuchung der Eignung arteigener Versatz-/Verschlussmaterialien für HAW-Endlager im Tongestein hat das Ziel, geotechnische Eigenschaften von Ausbruchmaterial aus dem Opalinuston (ist den in einem deutschen Endlager zu erwartenden Wirtsgestein am ähnlichsten – Standortmodell SÜD) und des Gemisches mit Bentonitzusatz experimentell zu bestimmen und die Eignung als Versatz- und Verschlussmaterialien zu analysieren. Dadurch soll ein verbessertes Verständnis für das Materialverhalten erreicht und eine Grundlage für eine belastbare Prognose der Langzeitprozesse im Versatz- und Verschlussystem mit Blick auf die langfristige Abdichtung eines Endlagers in einer Tonsteinformation geschaffen werden. Damit leistet das Projekt einen Beitrag zur Absicherung der Grundlagen für die Langzeitsicherheitsanalyse von HAW-Endlagern in Deutschland.

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Laboruntersuchungen werden am Ausbruchmaterial aus der Auffahrung einer neuen Strecke in der sandigen Fazies des Opalinustons im Untertagelabor Mont-Terri und am Gemisch mit Bentonitzusatz in drei Arbeitspaketen durchgeführt:

- AP 1: Ermittlung der geotechnischen Eigenschaften wie z.B. Kompaktion und Permeabilität des Ausbruchmaterials zur langfristigen Abdichtung der Endlager Hohlräume,
- AP 2: Ermittlung der geotechnischen Eigenschaften des kompaktierten Gemisches aus dem Ausbruchtonstein mit Bentonitzusatz zur Prüfung der Eignung für den Verschluss der Strecken und Schächte und
- AP 3: Ermittlung der geotechnischen Eigenschaften des Gemisches aus dem Ausbruchtonstein mit Bentonitzusatz zur Prüfung der Eignung als HAW-Buffermaterial bei hohen Temperaturen in Form von hochverdichteten Formsteinen für Auflager von Abfallbehältern und in Form von Granulat zur Verfüllung des Resthohlraums.
- AP 4: Untersuchung des Gastransportes in geschädigtem Tonstein zur Beteiligung am EU-Projekt EURAD im WP6-GAS

**3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse**

Fertigstellung des GRS-Projektberichts GRS-704.

**4. Geplante Weiterarbeiten**

Keine

**5. Berichte, Veröffentlichungen**

Sealing of Fractures in indurated Claystones. Experimental Study as part of the EC Joint Project EURAD WP 6-GAS, Final report. GRS-704, ISBN 978-3-949088-95-7, January 2024

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11668A	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Smart-K <sub>d</sub> in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (Teilprojekt GRS im Verbundvorhaben SMILE)			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2018 bis 31.05.2024		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 31.05.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.249.122 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Ulrich Noseck	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt SMILE (Partner: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V. (HZDR) und Institut für Nukleare Entsorgung des KIT (KIT-INE)) basiert auf den Erkenntnissen der Vorhaben ESTRAL und WEIMAR, in denen das Smart-K<sub>d</sub> Konzept für Langzeitsicherheitsanalysen entwickelt, optimiert und in das Rechenprogramm r<sup>3t</sup> implementiert wurde. In SMILE sollen (i) das bisher entwickelte Konzept um den Einfluss von Redoxreaktionen erweitert, (ii) die chemische Beschreibung durch die Ermittlung der Stöchiometrie, Struktur und thermodynamischer Parameter wichtiger Oberflächenkomplexe weiter untermauert, (iii) unterschiedliche State-of-the-art Oberflächenkomplexmodelle zur Auswertung von vorhandenen experimentellen Daten angewandt, (iv) die Sorptions-Datenbasis durch geeignete Batch- und Säulenexperimente weiter ergänzt und (v) das Konzept durch gezielte Experimente und Modellierung von naturnahen Systemen kritisch überprüft werden. Das hier zu entwickelnde Konzept wird auf andere Formationen wie auch auf andere Codes übertragbar sein und somit auch einen Wissenstransfer zu anderen Forschungsfeldern gestatten.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP1: Konzepterweiterung  
(Weiterentwicklung des konzeptuellen Modells: Implementierung von Redox-Prozessen, Erarbeitung eines Konzepts zur Berücksichtigung organischer Liganden)
- AP2: Verifizierung des erweiterten WEIMAR-Konzepts  
(Vergleichsrechnungen für einfache Testfälle mit PHREEQC bzw. PHAST)
- AP3: Titrations-, Sorptions- und Transportexperimente  
(Durchführung von Laborexperimente u. a. im Rahmen von Bachelor-/Masterarbeiten)
- AP4: Parametrisierung und Berechnung von Smart-K<sub>d</sub>-Matrizen  
(Ableitung thermodynamischer Sorptionsdaten und K<sub>d</sub>-Berechnung für das erweiterte Konzept)
- AP5: Großräumige Anwendungsrechnungen  
(Strömungs- und Transportrechnungen für ausgewählte Modellgebiete)
- AP6: Qualitätsmanagement / Dokumentation / Internetseite

### **3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse**

- AP2: Behebung eines grundsätzlichen Fehlers im Code, Wiederholung einiger Rechnungen und Dokumentation der Ergebnisse.
- AP5: Abschluss und Dokumentation der großräumigen Strömungs- und Transportrechnungen unter Anwendung des neuen Konzepts.
- AP6: Fertigstellung des Projektabschlussberichts.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Keine, das Projekt ist beendet.

### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Noseck, U., Brendler, V., Lützenkirchen, Fricke, J., Britz, S., Frank, T., Gehrke, A., Zhao, H., Schmidt, M., Neumann, J., Lessing, J., Bezzina, J., Stockmann, M., Brinkmann, H.: Smart K<sub>d</sub> in long-term Safety Assessment (SMILE). Final report. GRS-770, October 2024, to be published.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11698
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Untersuchung thermisch-hydraulisch-mechanisch-chemischer Einwirkungen auf zementbasierte Dichtelemente (THyMeCZ)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2018 bis 31.12.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 2.558.457,16 €	<b>Projektleiter:</b> Dr. Thorsten Meyer	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Vorhabens ist die systematische Untersuchung der thermischen, hydraulischen, mechanischen und chemischen Prozesse (THMC-Prozesse), die sich auf die Integrität eines Abdichtungselements bzw. des gesamten Abdichtsystems in einem Endlager auswirken können. Aufbauend auf den Erkenntnissen zahlreicher Pilotversuche an kombinierten Prüfkörpern aus Salzbeton und Steinsalz, die im Rahmen von LAVA-2 und LASA-EDZ gewonnen wurden, sollen, anhand systematisch aufgebauter Versuchsreihen, einzelne/gekoppelte THMC-Prozesse untersucht und die daraus resultierende Wirkung auf die Integrität der geotechnischen Barriere herausgearbeitet werden.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP 1: Bereitstellung von Material und Methoden  
 AP 2: HC-Versuche  
 AP 3: HMC-Versuche  
 AP 4: THC-Versuche  
 AP 5: TM-Versuche  
 AP 6: THMC-Versuche  
 AP 7: Modelltheoretische Untersuchungen  
 AP 8: Dokumentation  
 AP 9: Analyse von Salzprüfkörpern aus der WIPP  
 AP 10: Langzeitkorrosionsexperimente  
 AP 11: MAGIC

### 3. Durchgeführte Arbeiten

#### AP 1 – Bereitstellung von Material und Methoden

Der von der GRS in Zusammenarbeit mit dem Arbeitskreis Betonkorrosion (AKB) vorbereitete Workshop „Zementbasierte Verschlussbauwerke im Salinar“ wurde erfolgreich durchgeführt; der Tagungsband hierzu liegt nun zum download bereit (GRS-765).

#### AP 2 – HC-Versuche

Die im AP 2 vorgesehenen Versuche wurden bereits erfolgreich abgeschlossen.

#### AP 3 – HMC-Versuche

Die im AP 3 vorgesehenen Versuche wurden bereits erfolgreich abgeschlossen.

#### AP 4 – THC-Versuche

Die im AP 4 vorgesehenen Versuche wurden bereits erfolgreich abgeschlossen.

#### AP 5 – TM-Versuche

Die im AP 5 vorgesehenen Versuche wurden bereits erfolgreich abgeschlossen.

#### AP 6 – THMC-Versuche

Zurzeit befindet sich noch eine kombinierte A1-Probe in einem der beiden Versuchsstände. Diese wird durch die im 2. Quartal erhaltenen US-Proben ersetzt.

#### AP 7 – Modelltheoretische Untersuchungen

Die Modellrechnungen haben bereits begonnen und werden im 2. HJ 2024 abgeschlossen sein. Z.Z. erfolgt die Abstimmung zur Zusammensetzung der Baustoffe sowie die Zusammenstellung der Datenbasis aus THEREDA. Die aktualisierte und nochmals revidierte THEREDA-Datenbasis wurde im 2. Quartal zur Verfügung gestellt.

#### AP 8 – Dokumentation

Erstellung der Dokumente zur Qualitätssicherung der Arbeiten im Projekt sowie die Erstellung des HJB und JB.

#### AP 9 – Untersuchung der Salzkörper aus der WIPP

SNL hat im zweiten HJ 2023 kombinierte Probekörper hergestellt und diese der GRS Ende des 2. Quartals 2024 zur Verfügung gestellt. Erste hydraulisch-mechanische Untersuchungen zum verwendeten US-Beton wurden bereits durchgeführt.

#### AP 10 – Langzeitkorrosionsversuche

Die im AP 10 vorgesehenen Versuche zur Langzeitkorrosion wurden erfolgreich abgeschlossen.

Alle Proben der HC/THC-Versuche wurden in eine definierte Langzeitlagerung überführt, damit sie in einem späteren Projekt Verwendung finden können.

#### AP 11 – MAGIC

Das EU-Projekt MAGIC wurde abgeschlossen. Die noch nicht beendeten Versuche werden fortgeführt. Es befinden sich 5 Prüfkörper in Vorbereitung. Hierfür musste eine Sonderanfertigung von Messketten erfolgen. Die Messketten wurden in 12/2023 geliefert und werden derzeit kalibriert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Ende des 2. Quartals sind die US-Proben in Braunschweig angekommen. Nach dem US-German Workshop soll in einer VK im Juli 2024 das weitere Vorgehen und das Versuchsprogramm besprochen werden. Die Modellrechnungen werden im 2. HJ 2024 durchgeführt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

-

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11819	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Mineralumwandlung und Sorption bei erhöhten Temperaturen in geklüfteten Kristallingesteinen und Barrierematerial (MUSE)			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2019 bis 31.08.2024		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.930.070,84 EUR		<b>Projektleiterin:</b> Dr. Artur Meleshyn	

### 1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Gesetz zur Suche und Auswahl eines Standortes für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle (Standortauswahlgesetz – StandAG) vom Juli 2013, bzw. Mai 2017 regelt das Auswahlverfahren für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle in Deutschland. Dabei kommen grundsätzlich die Wirtsgesteine Steinsalz, Tongestein und Kristallingestein in Betracht. Im Rahmen der Forschungsvorhaben CHRISTA, KONEKD, CHRISTA-II, SUSE und UMB wurden, bzw. werden einerseits verschiedene Fragestellungen bezüglich des technischen Konzepts und des Sicherheits- und Nachweiskonzepts für ein Endlager im Kristallingestein bearbeitet, und andererseits Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren als Funktion von Lösungszusammensetzung, Temperatur und mikrobieller Aktivität untersucht.

Basierend auf den genannten Arbeiten und in ihrer Fortführung soll in dem hier skizzierten Projekt MUSE (i) die Übertragbarkeit der mit der im Projekt SUSE entwickelten neuen Methode gewonnenen Sorptionsdaten überprüft und die Anwendbarkeit auf andere Kristallinstandorte durch Erhebung einer Bandbreite von Sorptionsdaten im Kristallingestein getestet werden, (ii) eine Methode zur Untersuchung des Einflusses von erhöhten Temperaturen auf Mineralumwandlungen und Gasfreisetzung in Kluffüllungen entwickelt werden und (iii) Mechanismen der Bentonitumwandlung und Gasfreisetzung untersucht werden.

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Vorhabens werden folgende Arbeitspakete bearbeitet:

AP 1: Übertragbarkeit der normierten Verteilungskoeffizienten zwischen verschiedenen Kristallin-Standorten

AP 2: Einfluss von erhöhten Temperaturen auf die Stabilität von Kluffüllungen

AP 3: Einfluss von erhöhten Temperaturen auf die Stabilität von Bentoniten

AP 4: Dokumentation und Projektleitung

### **3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse**

AP 1: Übertragbarkeit der normierten Verteilungskoeffizienten:

Die BET-Messungen wurden abgeschlossen.

AP 2: Einfluss von erhöhten Temperaturen auf die Stabilität von Kluffüllungen:

Keine Arbeiten durchgeführt.

AP 3: Einfluss von erhöhten Temperaturen auf die Stabilität von Bentoniten:

Keine Arbeiten durchgeführt.

AP 4: Dokumentation und Projektleitung:

Die Vorbereitung des Abschlussberichtes wurde begonnen.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP 1: Keine weiteren Arbeiten.

AP 2: Keine weiteren Arbeiten.

AP 3: Keine weiteren Arbeiten.

AP 4: Fertigstellung des Abschlussberichtes.

### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

- keine -

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11829</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Tonforschung im Felslabor Mont Terri ab Phase 25 (MonTe-25)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.2 Endlagertechnik C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2019 bis 31.12.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 2.070.240,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr.-Ing. Oliver Czaikowski	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Als Partner im Betreiber-Konsortium führt die GRS seit 1999 im Auftrag des BMWi Forschungsarbeiten im schweizerischen Untertagelabor Mont Terri im Opalinuston durch. Die Fortführung der Arbeiten zur Tonforschung in Mont Terri in den kommenden Phasen dient (1) der Erarbeitung eines fundierten Verständnisses der für die Systementwicklung wichtigen thermisch-hydraulisch-mechanischen (THM) Prozesse, (2) der Entwicklung qualifizierter Prozessmodelle durch Vergleich von Modellrechnungen mit Experimenten in situ und im Labor, (3) der Sammlung zuverlässiger Daten zum Materialverhalten zur Qualifikation der Prozessmodelle; dazu Entwicklung bzw. Verbesserung von Messmethoden und (4) dem Wissenserwerb durch die Zusammenarbeit mit internationalen Fachkollegen.

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP1: FE Experiment – Porendruckmessungen und Modellrechnungen als Beitrag zum Streckenlagerungsexperiment der NAGRA im 1:1 Maßstab
- AP2: HE-E Experiment – Weiterführung des im Rahmen des EU-Projekts PEBS aufgebauten Erhitzerversuchs im Mikrotunnel (mit NAGRA, ENRESA, BGR, Obayashi)
- AP3: DM-A Experiment – Langzeitverformungsmessung des Tonsteins in einem Bohrloch
- AP4/5/6: Keine Fortführung der Arbeiten
- AP7: Weiterentwicklung von VIRTUS für den Einsatz im Tonstein
- AP8: Mine-By Experiment (MB-A) in der sandigen Fazies (mit BGR und Swisstopo)
- AP9: CD-A Experiment in der sandigen Fazies (Konsortialführer BGR)
- AP10: Technical und Steering Meetings

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

**AP1:** Im Berichtszeitraum ist das Monitoring der Porendrücke sowie der Gebirgstemperaturen planmäßig fortgesetzt worden. Die Auswertung der Daten zeigt eine Fortsetzung der im letzten Berichtszeitraum beobachteten Trends: Die Porendrücke im Bereich des Verschlusses stabilisieren sich bei Werten zwischen 850 kPa und 1100 kPa. Die ebenfalls im Bereich des Verschlusses gemessenen Temperaturen stabilisieren sich zwischen 19°C und 20°C.

Am Tunnelende ist ein weiterer Sensor ausgefallen. Die noch funktionierenden Sensoren am Tunnelende steigen wie im vorherigen Berichtszeitraum weiter an und übersteigen nun die 20°C. Damit scheint sich das von den Erhitzern erzeugte Temperaturfeld weiter axial in das Gebirge hin auszubreiten.

**AP2:** Nachdem im 2.Hj. 2023 bei der zweiten Bohrung auf die Technik mit der Harzinjektion verzichtet und stattdessen Fiber-Glasrohre zur Aufnahme des teilgesättigten Bentonitmaterials verwendet wurden, konnte der Kerngewinn erheblich verbessert werden. Diese Kerne sollen in der laufenden Phase 29 von den Partnerorganisationen Uni Bern und CIEMAT hinsichtlich ihrer mineralogischen und physiko-chemischen Eigenschaften untersucht und Alterationsprozesse identifiziert werden. Mit den für die kommende Phase 30 erwarteten abgeleiteten Materialkennwerten sollen von allen Partnern die Modellieraktivitäten verstärkt aufgenommen werden, um dann über den weiteren Verlauf (Temperaturerhöhung vs. Abschaltung) des Experimentes zu entscheiden.

**AP3:** Die Messungen wurden fortgeführt, die Messwerte bestätigen den Übergang in eine Beruhigungsphase der Porendruckverhältnisse im Umgebungsbereich der Piezometersensoren. Eine Interpretation der von der GRS erhobenen Messdaten im Hinblick auf die Ableitung von langfristigen Gebirgsdeformationen (als Ziel des Experiments), die nicht durch zusätzliche Hohlraumauffahrungen überlagert werden, erforderte den Austausch mit dem RI-Experiment (Response Investigation, PI Nagra). Am 16.04.24 haben sich die Partner Nagra, BGR, Swisstopo, SED (Schweizer Erdbebendienst), Uni Neuchatel und GRS bei einem Online-Meeting über den aktuellen Stand ausgetauscht und die geplanten Arbeiten für die nächste Phase 30 in einem 5-pager dokumentiert. Anlässlich des TM-41 wurden die Beiträge in einem gemeinsamen Poster zusammengefasst und vorgestellt.

**AP9:** Im Berichtszeitraum sind in der offenen sowie der geschlossenen Nische des CD-A-Experiments jeweils zwei Minipiezometer installiert worden. Die Bohrungen sind von der Ortsbrust aus in die Formation gestoßen worden und sind 2,5 m bzw. 5 m lang. Nach der Installation der Piezometer sind diese mit einem Lösungsdruck von 8 bar beaufschlagt worden, um deren Dichtigkeit sowie Funktion zu überprüfen. Die Prüfung war erfolgreich, da sich der am Manometer abgelesene Druck auch über längere Zeit bedeutend über dem Atmosphärendruck einstellte.

Bei dem darauffolgenden Anschluss der elektrischen Druckaufnehmer der Minipiezometer an die Datenaufnahme sind Schwierigkeiten aufgetreten, weswegen eine automatisierte Datenaufnahme im Berichtszeitraum noch nicht umgesetzt werden konnte.

**AP10:** Teilnahme an SM-94 am 14.03.24 bei der BGE, Teilnahme am TM-41 am 08.05.24 in St.Ursanne.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Fortführung der Porendruck- und Temperaturmessungen, Identifizierung aussagekräftiger Messsensoren für zur Vorbereitung des Arbeitsplans für die kommende Phase 30, Teilnahme an Steering Meetings und VK zu den einzelnen APs.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

TM-41, *Mont Terri whispering gallery – The far-field response by the lab on the excavation of Ga18 (RI Experiment)*, M. Schoenball, G. Armand, O. Czaikowski, D. Jaeggi, H. Shao, A. Zappone & D. Rebscher, poster presentation

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Johannes-Gutenberg-Universität Mainz, Saarstr. 21, 55122 Mainz		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11860A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen – Phase II (GRaZ II), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2020 bis 31.12.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 735.947,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Reich	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Thema des Forschungsvorhabens ist die Rückhaltung von Actiniden im Nahfeld eines Endlagers für Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle in Tonsteinformationen Norddeutschlands gemäß dem Standortmodell NORD. Für den Sicherheitsnachweis eines solchen Endlagers gibt es Wissenslücken zum Einfluss von gelöstem Eisen, das bei der Korrosion der Einlagerungsbehälter freigesetzt wird, sowie von organischen Liganden, die aus der Beton- bzw. Zementkorrosion der technischen Barriere resultieren. Eine Besonderheit des Standortmodells NORD besteht in der mittleren bis hohen Ionenstärke der Formationswässer des Tongesteins. Deshalb wird der Einfluss von Eisen sowie der organischen Liganden auf die Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen unter hyperalkalinen Bedingungen bei mittleren bis hohen Ionenstärken quantifiziert werden. Dazu werden die Prozesse Sorption, Diffusion, Komplexierung und Redoxtransformation mit experimentellen Methoden studiert, auf molekularer Ebene aufgeklärt und mit thermodynamischen Modellen beschrieben. Auf der Basis der in diesem Projekt und dem vorhergehenden Verbundvorhaben GRaZ I erzielten Ergebnisse soll kritisch bewertet werden, in wieweit vorhandene Befunde für Systeme niedriger Ionenstärke auf die Bedingungen mittlerer bis hoher Ionenstärke gemäß dem Standortmodell NORD anwendbar sind. Dazu werden auch die im Rahmen des europäischen Projektes CORI erzielten Ergebnisse herangezogen. Im Rahmen des Verbundprojekts wird schwerpunktmäßig mit dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, dem Karlsruher Institut für Technologie, der Universität des Saarlandes, der Universität Potsdam und der TU München zusammengearbeitet.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- Einflusses von Fe(II) auf die Rückhaltung von Actiniden an Zementphasen bei mittleren bis hohen Ionenstärken
- Einflusses von niedermolekularen organischen Liganden auf die Rückhaltung von Actiniden an Zementphasen bei mittleren bis hohen Ionenstärken
- Komplexierung von Actiniden mit ausgewählten organischen Referenzliganden

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Der Einfluss von Gluconat (GLU) auf die Rückhaltung von Pu(IV) an frischen und gealterten CSH-Phasen, d.h. C:S = 1,65 und C:S = 0,8, wurde weiter untersucht. Die Batchexperimente fanden bei mittlerer Ionenstärke in verdünnter Gipshuttlösung (VGL-C) statt, die zuvor über zehn Tage lang mit den jeweiligen CSH-Phasen equilibriert und anschließend zentrifugiert worden war. Die CSH-Suspensionen wurden mit  $10^{-8}$  M Pu(IV) und  $10^{-2}$  M GLU kontaktiert, wobei die Reihenfolge der Zugaben, die im Abstand von 72 h erfolgten, folgendermaßen variiert wurde: i) zuerst Pu und dann GLU; ii) zuerst GLU und dann Pu und iii) gleichzeitige Zugabe von Pu und GLU. Die Kontaktzeit nach jeder Zugabe betrug 72 h. Bei der CSH-Phase mit einem C:S-Verhältnis von 0,8 und pH = 9,5 hatte die Reihenfolge der Zugaben keinen Einfluss auf den Verteilungskoeffizienten ( $R_d$ -Wert) von Pu. Bei der CSH-Phase mit C:S = 1,65 und pH = 11,5 war jedoch zu beobachten, dass sich der in Abwesenheit von GLU bestimmte  $\log R_d$  für Pu von 5,6 deutlich verringerte. Für die Sequenz i) wurde  $\log R_d = 3,6$  gemessen, was darauf hindeutet, dass Pu bei hoher GLU-Konzentration von der Oberfläche der CSH-Phase desorbiert. Bei den Sequenzen ii) und iii) wurde ein noch kleinerer  $R_d$ -Wert mit  $\log R_d$  von 2,3 bis 2,5 gestimmt. Möglicherweise konkurrieren GLU und Pu um Sorptionsplätze an den CSH-Oberflächen und / oder verschiedene Pu-Komplexe mit GLU und eventuell Ca erhöhen die Pu-Konzentration in Lösung. Des Weiteren zeigten Langzeitexperimente über 136 Tage, dass das in die CSH-Phasen eingebaute Pu durch  $10^{-2}$  M GLU in VGL-C nicht mehr mobilisiert wird.

Zur Überprüfung der von Mancini et al. publizierten Daten zur Sorption von Fe(II) an CSH-Phasen wurde das Experiment für C:S = 0,8 im Bereich von  $1 \times 10^{-7}$  bis  $8 \times 10^{-4}$  M Fe(II) in CSH-Mutterlauge bei pH 10,7 in einer elektrochemischen Sorptionszelle studiert. Die nach zwei Tagen Kontaktzeit ermittelte Sorption von Fe lag zwischen 73 und 99 %. Leider konnte aus experimentellen Gründen keine Sorptionsisotherme für Fe(II) erstellt werden, so dass das Experiment wiederholt werden muss.

Der Versuch zur Diffusion von  $8 \times 10^{-6}$  M  $^{237}\text{Np(V)}$  in Zementstein (HCP) in Anwesenheit von  $10^{-2}$  M Isosaccharinsäure (ISA) wurde abgeschlossen. Als mobile Phase diente dabei Zementporenwasser (VGL-Z, pH = 12,3), das durch Equilibrierung von VGL mit HCP erhalten worden war. Nach einer Versuchsdauer von 238 Tagen wurde der Zementkern ausgebaut, getrocknet und mit der abrasiven Schleifmethode bearbeitet, um die Eindringtiefe von Np radiometrisch zu bestimmen. Die Messungen von Eh und pH in dem Diffusionsreservoir deuten auf eine Reduktion von Np(V) zu Np(IV) hin. Die Diffusionslänge von Np unter diesen Bedingungen lag bei ca. 140  $\mu\text{m}$  und ist damit deutlich geringer als bei einem analogen Experiment mit Pu(IV).

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- EXAFS-Messungen an der Rossendorf Beamline (ESRF) zur Wechselwirkung von Am(III), Th(IV), Pu(IV), Np(V) und U(VI) mit CSH-Phasen (C:S 0,8)
- Auswertung und Modellierung der Diffusionsexperimente

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

A. Bösch, Einfluss von Gluconat auf Sorption und Einbau von Plutonium in CSH-Phasen, 2024 (Masterarbeit).

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b>		<b>Förderkennzeichen:</b>	
Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		02 E 11860B	
<b>Vorhabensbeschreibung:</b>			
Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ II), Teilprojekt B			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b>			
C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b>		<b>Berichtszeitraum:</b>	
01.10.2020 bis 31.12.2024		01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b>		<b>Projektleiter:</b>	
719.658,00 EUR		Dr. Katja Schmeide	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Schwerpunktmäßig soll der Einfluss von Eisen sowie von organischen Liganden auf die Freisetzung bzw. Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide (U, Cm, Pu) in Systemen mit Zementphasen, Tonmineralphasen und Ca-Bentonit als Puffermaterial in hyperalkalinen Medien mittlerer bis hoher Ionenstärke untersucht werden. Hierfür werden Batch-Sorptionsexperimente und spektroskopische Methoden kombiniert. Im Mittelpunkt der Untersuchungen stehen niedere Oxidationsstufen der Radionuklide. Dabei soll der Einfluss von Fe(II) bzw. von Fe(III) bezüglich konkurrierender Effekte auf die Rückhaltung bzw. Komplexierung von Actiniden identifiziert werden. Weiterhin soll der Einfluss von Fe(II) auf die Redoxstabilität von Actiniden in höheren Oxidationsstufen speziell für U und Pu untersucht werden. Die Stabilität Actinid-dotierter Phasen in komplex zusammengesetzten Lösungen erhöhter Ionenstärke wird untersucht. Spektroskopische Untersuchungen der binären Uran(VI,IV)–Ligand-Systeme werden durchgeführt, um molekulare Strukturen und Komplexbildungskonstanten im zementrelevanten pH-Bereich zu ermitteln. Die geplanten Batchsorptions- und Komplexierungsexperimente in Kombination mit sich jeweils ergänzenden spektroskopischen Methoden liefern komplementäre Informationen (sowohl zu chemischen Alterationsprozessen als auch zu strukturellen Veränderungen), die zu einem detaillierten mechanistischen Verständnis der Radionuklid-Immobilisierung unter Endlagerbedingungen beitragen. Das Forschungsvorhaben erfolgt in Kooperation mit den Förderprojekten der Universitäten Mainz, Dresden, Saarbrücken, München, Heidelberg, Potsdam und des Karlsruher Instituts für Technologie.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

1. Uran-Rückhaltung an C-S-H-Phasen unter reduzierenden Bedingungen – Einfluss niedermolekularer organischer Liganden
2. Curium(III)-Rückhaltung an C-(A-)S-H-Phasen – Einfluss von Fe(III)
3. Plutonium-Rückhaltung an C-(A-)S-H-Phasen – Einfluss von Fe(II), Fe(III)
4. Uran-Rückhaltung an Ca-Bentonit unter reduzierenden Bedingungen – Einfluss niedermolekularer organischer Liganden
5. Plutonium-Rückhaltung an Ca-Bentonit unter reduzierenden Bedingungen – Einfluss von Fe(II)
6. Uran(VI)- und Uran(IV)-Komplexierung mit kleinen organischen Molekülen
7. Nachwuchsförderung im Bereich der nuklearen Entsorgung
8. Transfer der Erkenntnisse und Integration der Ergebnisse für den Sicherheitsnachweis

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Es wurden weitere  $^1\text{H}$ -NMR-Untersuchungen zur Ln(III)-Komplexierung durch Gluconat in Abhängigkeit der Ln(III)-Konzentration im pH-Bereich 1 bis 13 durchgeführt und kinetische Effekte untersucht. Jüngste Experimente umfassten das erneute Messen gealterter Proben einschließlich Temperaturvariation während der NMR-Messung sowie Ultrazentrifugation und Dynamische Lichtstreuung. Die Lösungen enthielten eindeutig kolloidale Ln(III)-Gluconat Spezies, die jedoch vergleichsweise langsam gebildet werden (innerhalb von Tagen bis Wochen). Darüber hinaus deuten die NMR-Spektren auf eine Koexistenz zahlreicher - möglicherweise polynuklearer - Spezies im alkalischen Medium hin. Interessanterweise zeigen die beiden Lanthanidionen La(III) und Lu(III) signifikante Verhaltensunterschiede (pH-Drift, Präzipitatbildung, Speziation), die auf die jeweiligen unterschiedlichen Lewis Aciditäten zurückgeführt werden können.
- Die systematischen Untersuchungen zur U(VI)-Citrat-Komplexierung im pH-Bereich 9 bis 13 wurden weitergeführt.  $^1\text{H}$ -NMR-Untersuchungen unter Variation der U(VI)- bzw. Citrat-Konzentration zeigten, dass U(VI)-Citrat-Komplexe bis pH 12 stabil sind. Für die exakte Identifizierung der in diesem pH-Bereich vorliegenden Spezies wurden nun Messungen mittels Elektrosprayionisation-Massenspektrometrie (ESI-MS) durchgeführt, welche gegenwärtig ausgewertet werden.
- Die experimentellen Untersuchungen zum Einfluss des Zementadditivs 2-Phosphonobutan-1,2,4-tricarboxylsäure (PBTC) auf die U(VI)-Rückhaltung an C-A-S-H-Phasen im Vergleich zu C-S-H-Phasen wurden als Funktion des Fest/Flüssig-Verhältnisses und der Ligandenkonzentration weitergeführt. Die Retentionsmechanismen für U(VI) und PBTC wurden mittels Laserfluoreszenzspektroskopie und NMR charakterisiert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Der Einfluss von Ca(II) und Al(III) auf die Stabilität der Eu(III)-NTA-Komplexe soll mittels TRLFS sowie ( $^1\text{H}$ - und  $^{27}\text{Al}$ -) NMR-Spektroskopie systematisch untersucht werden.
- Weiterführung bzw. Abschluss der Untersuchungen zur Ln(III)-Komplexierung durch Gluconat, zur U(VI)-Komplexierung durch Citrat sowie zum Einfluss von PBTC auf die U(VI)-Rückhaltung an C-A-S-H-Phasen bzw. von NTA auf die Eu(III)-Rückhaltung an C-A-S-H-Phasen. Veröffentlichung der Forschungsergebnisse in internationalen Zeitschriften mit Peer-Review.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Sieber, C., Kretschmar, J., Drobot, B., Tsushima, S., Schmeide, K., Stumpf, T.: Eu(III) and Cm(III) complexation by nitrilotriacetic acid to further evaluate its impact on the radionuclide retention by cementitious phases. JuRadChem Field trip 2024, Paul-Scherrer-Institut, Villigen, Switzerland, 29.02.- 03.03.2024. (Poster)

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe)		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11860C</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen – Phase II, (GRaZ II), Teilprojekt C		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2020 bis 31.12.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.6.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 539.828,50 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Marcus Altmaier	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Thema des Forschungsvorhabens ist die Rückhaltung von Radionukliden (Actiniden) im Nahfeld eines Endlagers für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle in Tonsteinformationen Norddeutschlands gemäß dem Standortmodell NORD. Für den Sicherheitsnachweis eines solchen Endlagers gibt es Wissenslücken, etwa zum Einfluss von organischen und silicatischen Liganden, die aus der Beton- bzw. Zementkorrosion der technischen Barriere resultieren können. Der Einfluss der organischen und silicatischen Liganden auf die Radionuklidrückhaltung soll an Zementkorrosionsphasen und dem Bentonitpuffer unter hyperalkalinen Bedingungen insbesondere bei mittleren bis hohen Ionenstärken quantifiziert werden. Dazu werden die Prozesse Sorption, Komplexbildung, Redoxtransformation und Löslichkeit mit experimentellen und ggf. quantenchemischen Methoden studiert, auf molekularer Ebene aufgeklärt und mit thermodynamischen Modellen beschrieben. Auf der Basis der erzielten Ergebnisse soll kritisch bewertet werden, in wieweit vorhandene Befunde für Systeme niedriger Ionenstärke auf die Bedingungen mittlerer bis hoher Ionenstärke gemäß dem Standortmodell NORD anwendbar sind.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Die Arbeiten von KIT-INE im Rahmen von GRaZ II gliedern sich in folgende Arbeitspakete:

AP 1: Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen und Bentonit unter hyperalkalinen Bedingungen bei mittleren bis hohen Ionenstärken.

AP 2: Wechselwirkung von Actiniden mit organischen und silicatischen Liganden.

AP 3: Nachwuchsförderung im Bereich der nuklearen Entsorgung.

AP 4: Transfer der Erkenntnisse und Integration der Ergebnisse für den Sicherheitsnachweis.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP 1: Die Struktur der ternären und quaternären Ca-An(III)-(OH)-EDTA-Komplexe wurde eingehend untersucht. Am KIT-INE wurden EXAFS-Experimente mit Am(III) und  $[EDTA] = 10^{-2}$  M bei zwei  $pH_m$  (8.7, und 11.2) und drei Ionenstärken ( $I_m(\text{CaCl}_2) = 0.1, 1.02, \text{ und } 5.36$ ) durchgeführt. Während die Spektren nur geringfügige Änderungen mit der Ionenstärke zeigen, steigt mit steigendem  $pH_m$  die Anzahl an Ca-Atomen von 1 auf 2 an. Hierbei sind diese an die Carboxyl-Gruppen des EDTA koordiniert. Insgesamt konnten fünf Koordinationsschalen ermittelt werden, welche den unterschiedlichen funktionellen Gruppen und Atomen des EDTA, Ca, sowie koordinierten  $\text{H}_2\text{O}$  bzw.  $\text{OH}^-$  zugeordnet sind. Die Ergebnisse deuten darauf hin, dass die Struktur der hier untersuchten Komplexe vergleichbar ist mit den analogen, literaturbekannten Komplexen  $[(\text{Pu(III)})(\text{EDTA})(\text{H}_2\text{O})_2]\text{Ca}(\text{H}_2\text{O})_4]^+$  und  $[(\text{Pu(III)})(\text{OH})(\text{EDTA})(\text{H}_2\text{O})\text{Ca}_2(\text{H}_2\text{O})_8]^{2+}$ .

AP 2: (i) Veröffentlichung der Studie zu den TRLFS Analysen im U(VI)-Silikat System; (ii) Abschluss der Löslichkeitsexperimente und spektroskopischen Untersuchungen der An(IV)-Silikat und An(III,IV)-Citrat Systeme, einschließlich der Bewertung des Einflusses von Ca.

AP 3: Erfolgreiche Verteidigung der Doktorarbeit von Frau Aline Thumm.

AP 4: Es waren hierzu von KIT-INE keine Aktivitäten in dieser Projektphase geplant.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP 1: (i) Einreichung eines Manuskripts zum Einfluss von EDTA auf die Sorption von Eu(III)/Cm(III) an CSH Phasen in salinaren NaCl bzw.  $\text{CaCl}_2$  Lösungen in einem wissenschaftlichen Journal mit Peer-Review. (ii) Beginn der Erstellung des Abschlussberichtes.

AP 2: (i) Beginn der Erstellung des Abschlussberichts.

AP 3: Es sind hierzu von KIT-INE keine Aktivitäten in der kommenden Projektphase geplant.

AP 4: Es sind hierzu von KIT-INE keine Aktivitäten in der kommenden Projektphase geplant.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Shang et al. (2024), Experimental and computational evidence of U(VI)-OH-Si(OH)<sub>4</sub> complexes under alkaline conditions: Implications for cement systems, Chemosphere 350, 141048, <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2023.141048>.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Universität des Saarlandes, Anorganische Festkörperchemie Postfach 15 11 50, 66041 Saarbrücken		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11860D</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt D		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2021 bis 30.06.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 656.091,50 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Kautenburger	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu den anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt GRaZ II befasst sich mit der Rückhaltung von Radionukliden an Zementalterationsphasen und Bentonit unter geochemischen Bedingungen (mittlere Ionenstärken im alkalinen Bereich von pH 11-13), die für die Tonformationen in Norddeutschland relevant sind (Standortmodell NORD). Hierbei werden schwerpunktmäßig solche Parameter untersucht, die die geochemische Radionuklidrückhaltung an Zement und Zementalterationsphasen auch in Anwesenheit von Fe(II)/Fe(III) beeinflussen. Es werden sowohl Immobilisierungs- als auch Remobilisierungsprozesse in Betracht gezogen. Im Teilprojekt der Universität des Saarlandes wird das Retentionsverhalten der Elemente des Waste-Cocktails (Zr(IV), Mo(VI), Ru(III), Pd(II), Cs(I), Sm(III), Eu(III), U(VI)) einzeln und im Gemisch an Zement und Zementalterationsphasen, wie Calcium-Silikat-Hydratphasen (C-S-H), sowie an Tonmineralien, wie beispielsweise Ca-Bentonit, untersucht. Dabei soll auch der Einfluss von Fe(II) berücksichtigt werden. Weiterhin wird der Einfluss des Zementadditivs PBTC (2-Phosphono-butan-1,2,4-tricarbonsäure) auf das Retentionsverhalten der Elemente des Waste-Cocktails von C-S-H-Phasen auf weitere Adsorbensmaterialien, wie beispielsweise Ca-Bentonit, ausgeweitet. Die Experimente werden als stationäre Batch-Experimente oder als dynamische Minisäulenexperimente (MSE) durchgeführt. Zur Untersuchung von festen Proben soll im Projekt die Kopplung einer Laserablation mit ICP-MS implementiert werden, um zusätzlich zu den Sorptionsdaten aus Batch-Experimenten eine orts aufgelöste Untersuchung der Adsorbensmaterialien, wie beispielsweise zur Bestimmung des genauen C:S-Verhältnis der C-S-H-Phasen oder Adsorptionsbereichen an Festphasen der MSE, durchführen zu können. Das Forschungsvorhaben erfolgt in Zusammenarbeit mit dem Karlsruher Institut für Technologie, dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf und den Universitäten Dresden, Heidelberg, Mainz, München und Potsdam.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Untersuchungen zur Retention von endlagerrelevanten Elementen bzw. Elementgemischen (Waste-Cocktail) an Korrosionsprodukten von Stahlbeton und Zementalterationsphasen unter dem Einfluss von hochsalinaren und hyperalkalinen Bedingungen
- AP2: Untersuchungen zur Retention an Festphasen unter dem Einfluss von Zementzusätzen unter hochsalinaren und hyperalkalinen Bedingungen
- AP3: Untersuchungen zur Fixierung und Remobilisierung der Waste-Cocktail-Elemente aus dotierten Festphasen
- AP4: Untersuchung zur Remobilisierungskinetik eingebauter Radionuklide aus dotierten Festphasen durch Konkurrenzreaktionen
- AP5: Zeitabhängige Retention des Waste-Cocktails an Festphasen im Batch und vergleichend in MSE sowie Implementierung einer LA-ICP-MS-Kopplung zur Untersuchung der Elementverteilung in den Festphasen
- AP6: Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt auf dem Gebiet der Geochemie und Radionuklidrückhaltung

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im angegebenen Zeitraum wurden Batch-Experimente zur Untersuchung des Rückhalts der Elemente Zr(IV), Mo(VI), Ru(III), Pd(II), Cs(I), Sm(III), Eu(III) und U(VI) an Portlandzement (CEM I) durchgeführt. Hierbei wurde der Rückhalt der o.a. Waste-Cocktail (WC) Elemente je einzeln als auch im Gemisch untersucht. Als Elektrolytlösungen wurden 0,1 M NaCl und Verdünnte Gipshut-Lösung (VGL) verwendet. In 0,1 M NaCl war der Rückhalt mit Ausnahme von Mo(VI) (21%) und Cs(I) (1,3%) für die Einzelement-Proben > 97%. Im WC-Gemisch war nur für Mo(VI) (15%) ein geringer Unterschied im Rückhalt im Vergleich zu den Einzelement-Untersuchungen zu verzeichnen, die übrigen Elemente verhielten sich äquivalent zum Einzelement-Experiment. In VGL sank, trotz der höheren Ionenstärke des Hintergrundelektrolyten, bei den Einzelement-Proben nur der Rückhalt von Mo(VI) von 21% auf 6%. Die restlichen Elemente verhielten sich analog zu den Batch-Experimenten in 0,1 M NaCl. Im WC-Gemisch sank erneut nur der Rückhalt von Mo(VI) von 15% (0,1 M NaCl) auf 6% (VGL). Somit hat eine höhere Ionenstärke lediglich einen Einfluss auf den Rückhalt von Mo(VI).

Zudem wurden je zwei mit Mo(VI), zwei mit Eu(III), zwei mit U(VI) und zwei Multielement-dotierte (Mo(VI), Eu(III) und U(VI)) C-S-H-Phasen ( $C/S = 1,07$ ) in jeweils niedriger ( $0,5 - 0,9 \mu\text{mol/g}$ ) und hoher ( $4,8 - 9,1 \mu\text{mol/g}$ ) Konzentration synthetisiert. Die Charakterisierung erfolgte mittels XRD und zeigte keine zusätzlichen Reflexe in den Diffraktogrammen im Vergleich zu nicht-dotierten CSH-Phasen, was wiederum relevante strukturelle Veränderungen durch die dotierten Analyten ausschließt. Mit den dotierten C-S-H-Phasen wurden Leaching-Experimente mit Reinstwasser sowohl im Batch als auch als mittels MSE (Minisäulen-Experiment) durchgeführt. In beiden Fällen konnte hinsichtlich Ca(II) and Si(IV) die Arbeit von Baston *et al.* (2012) bestätigt werden. Zu Beginn der Experimente wurde aufgrund des C/S mehr Ca(II) als Si(IV) aus den CSH-Phasen gelöst, wobei im späteren Verlauf ein kongruentes Lösen beobachtet werden konnte. Außerdem wurde sowohl im Batch als auch im MSE für Mo(VI) die höchste Remobilisierung (im Bereich von etwa 70 - 85%) festgestellt. Die Kurvenverläufe glichen sowohl für die absoluten Konzentrationen als auch für die prozentuale Remobilisierung einer abfallenden Exponentialfunktion, was auf zwei unterschiedlich starke Rückhaltmechanismen schließen lässt. Das Leaching von Eu(III) und U(VI) folgte keinem erkennbaren Muster und im Vergleich zu Mo(VI) wurden nur geringe Mengen der Analyten (für Eu(III) max. 2 %, für U(VI) max. 0,8 %) in Lösung wiedergefunden. Folglich unterliegen diese beiden Analyten starken, nahezu irreversiblen, Rückhaltmechanismen wie Fällung, Oberflächenadsorption oder Einbau in die C-S-H-Phasen.

Zusätzlich wurde in MSE versucht, Eu(III) mit Al(III) von/aus den C-S-H-Phasen zu verdrängen. Dazu wurde ein fünffacher Überschuss an Al(III) (bezogen auf Eu(III)) in das System injiziert. Die Remobilisierung von Eu(III) unterschied sich jedoch nicht von den Leaching-Experimenten und somit konnte unter den gewählten Bedingungen Eu(III) nicht durch Al(III) verdrängt werden. Vielmehr konnte ein Rückhalt von etwa 92 % des Al(III) an der jeweiligen C-S-H-Phase nachgewiesen werden.

Ferner wurde die Herstellung von C-S-H-Festphasenstandards dahingehend optimiert, dass die WC-Elemente homogen in den Standardproben verteilt sind. Dabei ist für die WC-Elemente eine relative Standardabweichung des Messsignals von < 2% möglich. Mit diesen Festphasenstandards sollte zukünftig eine Quantifizierung der WC-Elemente in C-S-H-Phasen mittels LA-ICP-MS routinemäßig möglich sein.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Bei zukünftigen Leaching-Experimenten mit den dotierten C-S-H Phasen soll der Einfluss von höheren Ionenstärken oder dem Komplexbildner PBTC im Eluenten auf die Analyten untersucht werden. Des Weiteren sollen Verdrängungs-Experimente mit zusätzlichen Konkurrenz-Ionen durchgeführt werden. Zudem soll die Routine-LA-ICP-MS-Quantifizierungsmethode mit Hilfe der dotierten C-S-H-Phasen validiert und somit die Implementierung vollendet werden.

**5. Berichte, Veröffentlichungen**

Bachmann N. (2024) Untersuchung der Adsorption endlagerrelevanter Elemente an Zement und CSH-Phasen, Masterarbeit, Fakultät NT, Universität des Saarlandes.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Technische Universität München		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11860E</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt E		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2020 bis 31.12.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 691.168,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. S. Krüger	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Vorhabensziele:

- Quantenmechanische Modellierung der Sorption von Actinoiden und Eisen an C-S-H-Phasen
- Quantenmechanische Modellierung der Komplexierung von Actinoiden in basischen Lösungen

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm umfasst folgende Arbeitspakete (AP):

1. Sorption an C-S-H-Phasen
2. Komplexierung von Actinoiden
3. Unterstützung spektroskopischer Experimente

AP 1 umfasst periodische Modelle von C-S-H-Festkörpern und -Oberflächen und die Untersuchungen der Wechselwirkung von Actinoiden mit diesen. Weiterhin wird die Sorption von Eisen und ihre Konkurrenz mit Actinoiden untersucht. In AP 2 werden Silikatkomplexe sowie Komplexe mit Lösungskationen der Actinoiden in wässriger Lösung untersucht. AP 3 ist der Unterstützung der Interpretation spektroskopischer Experimente im Verbund durch entsprechende quantenmechanische Modellierungen im Bedarfsfall gewidmet.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP 1.1: Modelle; AP 1.4: Vergleich Th(IV) und U(IV); AP 1.5 Sorption und Konkurrenz Fe; AP 2.1: Silikatkomplexe; AP 3: Unterstützung Experimente

Modellierungen zur Sorption von Th(IV) im Vergleich mit U(IV) in CSH wurden für  $C/S = 1$  fortgesetzt (AP 1.4). Für alle Sorptionsplätze in der Zwischenschicht wurden inzwischen die gleichen hydrolysierten Spezies für Th(IV) und U(IV) gefunden. Soweit verschiedene Komplexe auf einem Platz erhalten wurden sind jeweils die gleichen für beide Actinoide bevorzugt. Die Sorption von Th(IV)-Aquakomplexen ist schwächer als für U(IV). Dieser Unterschied nimmt mit zunehmender Hydrolyse ab. Untersuchungen zu Unterschieden der Sorption von U(IV) und Th(IV) in Abhängigkeit des Hydrolysegrads der Sorbate werden fortgesetzt. Signifikante Unterschiede der Struktur von sorbiertem Fe(II) in 14 Å-Tobermorit zu EXAFS motiviert die Modellierung der Fe(II)-Sorption in 11 Å-Tobermorit, wo kurze Fe-Ca-Kontakte erleichtert sind. Für Fe(II) in der Zwischenschicht wird im Gegensatz zur Interpretation des Experiments eine CN von 4 bestätigt. Für alle bisherigen Plätze wurde im Wesentlichen weiterhin Fe-Si < Fe-Ca gefunden, im Gegensatz zur Messung. Im Unterschied zu 14 Å-Tobermorit sind in 11 Å-Tobermorit Plätze an Silikatkettendefekten ungünstig. Diese Arbeiten werden fortgesetzt. Rechnungen mit Tobermoritmodellen mit sorbiertem Fe(II) zur Untersuchung des Effekts auf die Sorption von Uran (AP 1.5) ergaben unerwartet komplexe Spinzustände, die eine Interpretation der Spezies (evtl. auch U(V)?) und der möglichen Reduktion von U(VI) erschweren. Weitere Analysen und Vergleichsrechnungen sind notwendig.

Arbeiten zu U(VI)-Silikatkomplexen wurden für U(VI)-Hydroxosilikatkomplexe fortgesetzt und auf Diuranyl-silikat erweitert (AP 2.1). Für ternäre U(VI)-Hydroxosilikatkomplexe mit Monosilikat und bis zu zwei Hydroxoliganden ergaben weitere Vergleiche, dass mit steigendem pH eher Aqualiganden als Monosilikat deprotoniert. Dies zeigt, dass derartige Komplexe zu erwarten sind. Während  $UO_2(OH)_2OSi(OH)_3^-$  in Experimenten von Projekt-partnern bestätigt wurde, fehlt  $UO_2(OH)OSi(OH)_3^0$  in der bisherigen Speziation. Komplexierungsenergien zeigen, dass dieser Komplexen im pH-Bereich zwischen den bekannten Komplexen  $UO_2OSi(OH)_3^+$  und  $UO_2(OH)_2OSi(OH)_3^-$  zu erwarten ist. Diuranl-Monosilikatkomplexe wurden für die Ladungen +2 bis 0 errechnet. Ihre Bildung aus Uranylmonosilikatkomplexen ist leicht endotherm.

Zur Unterstützung der Interpretation von Experimenten von Projektpartnern zur Komplexierung des Modellzementadditivs PBTC mit U(VI) wurden weitere Rechnungen durchgeführt (AP 3) um spektrale Spezies Komplexen zuzuordnen. Die Bildung von 1:3-Komplexen aus 1:2-Komplexen ist nur bei tiefem pH exotherm. Der Vergleich von 1:2-Komplexen mit wachsender Deprotonierung der Liganden zeigt, dass aufgrund der  $pK_a$ -Erniedrigung im Komplex (etwa 2 Einheiten) Spezies mit einfach deprotonierten Liganden für  $pH > 2$  nicht anzunehmen sind. Zu Experimenten an Lanthanid-Gluconat-Komplexen (AP 3) der Projektpartner wurden 1:1-Komplexe von Lanthan und Gluconat detailliert untersucht. Für einfach deprotoniertes Gluconat ( $H_5Glu^-$ ) wird eine Chelatkoordination über die Carboxyl- und zwei OH-Gruppen als stabilstes Isomer berechnet. Mit wachsendem pH ergibt sich bei weiterer Deprotonierung ein Chelatkomplex mit einer deprotonierten OH-Gruppe am Gluconat. Dieser Komplex ist stabiler als ternäre Hydroxogluconatkomplexe gleicher Ladung. Für Monogluconatkomplexe der Ladung 0 ergaben sich ein  $H_3Glu$ -Komplex und ternäre  $H_4Glu-OH$ -Komplexe als nahezu entartet. Damit ist gezeigt, dass ab einem entsprechenden pH ternäre Hydroxogluconatkomplexe zur Speziation beitragen können.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP 1.1: Modelle; AP 1.4: Vergleich Th(IV) und U(IV); AP: 1.5 Sorption und Konkurrenz Fe; AP 2 Silikatkomplexe; AP 3: Unterstützung Experimente.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Universität Potsdam (Physikalische Chemie), Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11860F</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt F		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2020 bis 30.06.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 546.703,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Michael U. Kumke	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

An der Universität Potsdam (Physikalische Chemie) werden besonders Laser-basierte optische Methoden zur Untersuchung der in den Verbund-Arbeitspakete AP1 und AP2 definierten Fragestellungen eingesetzt und (weiter)entwickelt. Die methodischen Entwicklungen analytischer, optischer Methoden und die systematischen Untersuchungen haben die Verbesserung des molekularen Prozessverständnisses der Wechselwirkungen von Actinoid-Ionen (bzw. Lanthanoid-Ionen als Analoga) mit Zementalterationsphasen oder Bentonit unter hyperalkalinen Bedingungen (AP1) sowie silicatischen Ligandensystemen (AP2) zum Ziel. Das Vorhaben wird in dem Verbundprojekt gemeinsam mit der Universität Mainz, dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, dem Karlsruher Institut für Technologie, der Universität des Saarlandes, der TU München, der TU Dresden sowie der Universität Heidelberg durchgeführt.

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete<sup>2</sup>

In dem Verbundprojekt wird die Rückhaltung von Radionukliden an Zementalterationsphasen und Bentonit unter geochemischen Bedingungen, die für die Tonformationen in Norddeutschland relevant sind (Standortmodell NORD), untersucht. Das Verbundprojekt enthält vier Arbeitspakete (AP):

- AP 1: Radionuklid-Rückhaltung an Zementalterationsphasen und Bentonit unter hyperalkalinen Bedingungen bei mittleren bis hohen Ionenstärken
- AP 2: Wechselwirkung von Actiniden mit organischen und silicatischen Ligandensystemen
- AP 3: Nachwuchsförderung im Bereich der nuklearen Entsorgung
- AP 4: Transfer der Erkenntnisse und Integration der Ergebnisse für den Sicherheitsnachweis

---

<sup>2</sup> Die Nummerierung der Arbeitspakete folgt der im Verbund festgelegten Einteilung.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die begonnenen Experimente zum Eu(III)/C-S-H/-System bei verschiedenen C/S-Verhältnissen (C/S=0.8, 0.9, 1.0, 1.2, 1.4, 1.65) wurden fortgeführt und die Proben bis zu einer Kontaktzeit von > 200 Tagen regelmäßig mittels TRLFS untersucht, um die Bedeutung des C/S-Verhältnisses für die Bildung der Ca-Si-Eu-Mischphase (in Konkurrenz zur Sorption des Eu(III) an die C-S-H-Phasen) aufzuklären. In den Überständen ausgewählter Proben wurde zudem die Ca-, Eu- und Si- Konzentration mittels ICP-OES bestimmt. Des Weiteren wurden erste Experimente mit künstlichen Porenwässern (NaCl, CaCl<sub>2</sub>, Kieselsäure, pH ~ 9.7, ohne Anwesenheit einer C-S-H Phase) durchgeführt, in denen selektiv nur die Ca- oder Si-Konzentration variiert wurde und die ausgefällte Ca-Si-Eu-Mischphase mit TRLFS charakterisiert wurde. Die Arbeiten zum binären Ln(III)/Gluconat-System (Ln=Eu, Sm) in Kollaboration mit dem HZDR und der JGU Mainz wurden mit Fokus auf den (hyper)alkalinen Bereich (pH 10 und 12) fortgeführt.

Mittels Transienten-Absorptionsspektroskopie (TAS) wurde die zeitaufgelöste Charakterisierung verschiedener U(VI)-Hydrolyse Komplexe fortgesetzt. Hierbei wurde vor allem im hohen Konzentrationsbereich ein mehrkerniger Komplex untersucht. Komplementär wurden die Proben zudem auch mittels TRLFS charakterisiert und mittels PARAFAC bzgl. der Speziation analysiert. TAS-Messungen am Salicylat-Systemen wurden fortgeführt. Auch die Speziation der reinen Liganden wird weiter verfeinert. Zusätzlich wurde die Flash-Photolyse zur Untersuchung kinetischer Prozesse beider Systeme genutzt, da diese Methode für die Untersuchung langsamer Kinetiken auf der  $\mu$ s-Zeitskala besser geeignet ist.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Experimente in künstlichen Porenwässern sollen ausgeweitet werden, wobei zunächst der Einfluss von [Ca] und [Si] und anschließend auch von [Eu], Ionenstärke und pH auf die Bildung der Ca-Si-Eu-Mischphase im Fokus stehen sollen. Auch der Einfluss der organischen Liganden NTA und Gluconat auf die Mischphase soll weiter untersucht werden. Hierbei soll vor allem die Zugabereihenfolge sowohl in den künstlichen Porenwässern als auch in C-S-H-Proben variiert werden und geklärt werden, inwieweit die Zugabe der Liganden zu Auflösung oder einer veränderten Zusammensetzung der bereits ausgefällten Ca-Si-Eu-Mischphase führt. Die Untersuchungen zum binären Eu(III)/Gluconat-System sollen gegebenenfalls auf die Anwesenheit von Ca(II) ausgeweitet werden. Die Sorptionsexperimente mit dem kommerziellen C-S-H-Material Circosil (C/S≈0.8) durchgeführt, in denen ebenfalls die Bildung einer Ca-Si-Eu-Mischphase beobachtet wurde, sind abgeschlossen und die TRLFS Daten werden bzgl. der Speziation mittels PARAFAC ausgewertet werden.

TAS- und Flash-Photolyse-Experimente an Uranyl werden fortgesetzt. Es wird die Hydrolyse von reinem U(VI)-Nitrat im Detail betrachtet, wobei besonders mehrkernige Komplexe im Fokus der Untersuchungen stehen und spektroskopisch charakterisiert werden. Auch weitere Untersuchungen der einzelnen Liganden, sowie deren Komplexe mit Metallen werden mittels TAS und Flash-Photolyse fortgeführt. U.a. werden mittels TAS und Flash-Photolyse Salicylat-Europium Komplexe (Eu(III) als Analogon für Cm(III), Am(III) sowie Salicylat als Proxy für Zementorganik) untersucht werden.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

(Es sind zwei Publikationen weiterhin Vorbereitung, eine davon gemeinsam mit dem HZDR und der JGU zur Gluconat-Komplexierung im hyperalkalinen pH-Bereich.)

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> TU Dresden, Professur für Radiochemie und Radioökologie, Sachgebiet Strahlenschutz		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11860G</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt G		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2023 bis 31.12.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 450.133,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Thorsten Stumpf	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In dem Verbundvorhaben wird die Rückhaltung von Radionukliden an Zementalterationsphasen und Bentonit unter geochemischen Bedingungen, die für die Tonformationen in Norddeutschland relevant sind, untersucht. Ziel ist die Aufklärung des geochemischen Verhaltens von Actiniden an/in Zementalterationsphasen und Bentonit unter dem Einfluss von Fe(II) und niedermolekularer organischer Liganden und Zementadditiven, die Erarbeitung grundlegender Erkenntnisse zur Wechselwirkung von Actiniden mit silikatischen und organischen Liganden bei mittleren bis hohen Ionenstärken und unter hyperalkalinen Bedingungen, die Nachwuchsförderung im Bereich nukleare Entsorgung sowie der Transfer und die Integration der Ergebnisse für einen Sicherheitsnachweis. Die Arbeiten dieses Teilprojektes beschäftigen sich mit dem Einfluss von PBTC (2-Phosphanobutan-1,2,4-tricarboxylsäure) auf die Speziation von Actiniden im System SiO<sub>2</sub>/(Polysilikat)-Actinid-Organik unter endlagerrelevanten Bedingungen. PBTC wird in der Herstellung von Zement verwendet und kann während der Betondegradation freigesetzt werden, Es sollen konsistente thermodynamische Standarddaten zur Komplexierung von PBTC mit Actiniden über SIT-Modellierung bestimmt sowie der Einfluss von PBTC auf die Wechselwirkung von Actiniden in silikathaltigen Lösungen charakterisiert werden. Das Projekt liefert einen wichtigen Beitrag für eine thermodynamisch fundierte Langzeitsicherheitsanalyse von nuklearen Endlagern. Das Forschungsvorhaben erfolgt in enger Kooperation mit den Projekten der Universitäten Mainz, Saarbrücken, München, Potsdam und Heidelberg sowie dem Institut für Ressourcenökologie vom Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf und dem Institut für Nukleare Entsorgung vom KIT.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Die Arbeiten dieses Projekt sind im Wesentlichen in das Verbundarbeitspaket AP2 „Wechselwirkung von Actiniden mit organischen und silikatischen Liganden“ angesiedelt. Das AP-TU1 beinhaltet die thermodynamische Charakterisierung der Protonierung des PBTC-Liganden, die ausführliche thermodynamische und strukturelle Charakterisierung der Komplexierung der Actinide (u.a. Am(III), Cm(III), Pu(III), Th(IV), U(VI), ggf. inaktive Analoga Eu(III), Nd(III)) mit dem PBTC-Liganden im sauren und alkalischen pH-Bereich als Funktion der Ionenstärke an NaCl und CaCl<sub>2</sub> sowie Untersuchungen zum Einfluss von Konkurrenzmetallionen (z.B. Fe<sup>2+</sup>) auf die Komplexierung. Entsprechende thermodynamische Standarddaten zur Komplexbildung ( $\log_{10}\beta_{n,m}^0$ ,  $\Delta_r H_m^0$ ,  $\epsilon_{j,k}$ ) werden aus SIT-Modellierungen abgeleitet. Im AP-TU2 wird der Einfluss von relevanten Liganden (Citrat, PBTC, Gluconat) auf die Eigenschaften von silikatischen Lösungen/Suspensionen bezüglich ihrer Speziation und daraus abgeleitet auf die Wechselwirkungen mit Actiniden untersucht. Geplant sind Batchsorptionsuntersuchungen mit Actiniden in gut charakterisierten (Poly)silicat-Ligand-Suspensionen. Die Sorptionsisothermen und Verteilungskoeffizienten (K<sub>d</sub>-Werte) sollen als Funktion der Ionenstärke (bis 3 m NaCl, CaCl<sub>2</sub>) und des pH-Wertes bestimmt werden.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

1) Die spektroskopischen Untersuchungen im An(III)/Ln(III)-PBTC-System wurden fortgesetzt. Es wurden NMR-Untersuchungen mit verschiedenen Lanthaniden (La, Lu, Eu) durchgeführt, da die paramagnetischen Eigenschaften von Eu bei NMR-Messungen problematisch sein können. Mit Lu und La konnte zwar eine Komplexierung mit PBTC nachgewiesen werden, jedoch sind die NMR-Spektren aufgrund von Mischsignalen nicht direkt hinsichtlich einer Speziationsbestimmung auswertbar. Entgegen den Erwartungen konnten nur in den Eu-PBTC-Proben bei pH-Werten  $> 7$  in Abhängigkeit vom Metall-Ligand-Verhältnis mehrere Eu-PBTC-Spezies identifiziert werden. Bei PBTC im Überschuss erfolgt die Komplexierung bei höheren pH-Werten über eine Chelatbindung. Dies wird auch durch IR-Untersuchungen bei pH 9 mit unterschiedlichen Metall-Ligand-Verhältnissen bestätigt. Die Ergebnisse zeigen, dass die Bindung von Eu sowohl an eine Carboxyl- als auch an eine Phosphonatgruppe erfolgt. Analoge IR-Untersuchungen bei pH 5 ergaben keine eindeutigen Signale und müssen wiederholt werden. Zur vollständigen Speziations- und Strukturaufklärung sind weitere Untersuchungen notwendig.

2) Diverse Experimente mittels UV-Vis-Spektroskopie und mittels isothermer Titrationskalorimetrie zur Bestimmung der thermodynamischen Daten zur Komplexierung von Eu/Nd mit PBTC wurden durchgeführt. Die Untersuchungen wurden in pufferfreien NaCl-Medium verschiedener Ionenstärken durchgeführt. Aufgrund der erforderlichen Konzentrationen im mM-Bereich kommt es jedoch in Abhängigkeit vom Nd/Eu-PBTC-Verhältnis und pH-Wert teilweise zur Bildung von Ausfällungen, die eine exakte Auswertung der Messungen nicht zulassen.

3) Im Berichtszeitraum wurde ein zweitägiger Workshop für die in GRaZ II beschäftigten Doktoranden und Nachwuchswissenschaftler federführend geplant, organisiert und durchgeführt. Der Workshop fand sowohl an der TU Dresden als auch am HZDR statt. Der Workshop beinhaltete eine ausführliche Führung am Ausbildungskernreaktor an der TUD und befasste sich mit den Karrieremöglichkeiten in der Radiochemie nach der Promotion. Eingeladen waren Gäste aus Industrie, Forschung und Behörden. Der Workshop wurde mit positivem Feedback sowohl von den Vortragenden Gästen als auch von den teilnehmenden Doktoranden und Nachwuchswissenschaftlern als erfolgreich bewertet.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- 1) Finalisierung der Veröffentlichung der Ergebnisse des U(VI)-PBTC-Systems
- 2) Fortführung der Untersuchung des Am(III)/Ln(III)-PBTC-Systems mittels NMR-, UV-Vis-, und TRLFS-Spektroskopie, Bestimmung der Speziation sowie Struktur der Komplexspezies
- 3) UV-Vis-Untersuchungen zur Bildung von U(IV) im U(VI)-PBTC-System bei Energieeintrag (vorrangig durch UV-Licht, Gammastrahlung)
- 4) Fortführung der ITC-Experimente (ITC = isotherme Titrationskalorimetrie) im Eu(III)-PBTC-System (Einsatz weiterer Puffer mit verschiedenen pH-Pufferbereichen)

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Universität Heidelberg		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11860H</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ II); Teilprojekt H: Spektroskopische Speziation von Ln-/An-Komplexen mit silicatischen und (zement)organischen Liganden		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2020 bis 31.05.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 403.292,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Frau Prof. Dr. Petra J. Panak	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Thema des Forschungsvorhabens ist die Rückhaltung von Radionukliden (Actiniden) im Nahfeld eines Endlagers für Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle in Tonsteinformationen gemäß dem „Standortmodell NORD“. Für den Sicherheitsnachweis eines solchen Endlagers gibt es Wissenslücken zum Einfluss von gelöstem Eisen, das bei der Korrosion der Einlagerungsbehälter freigesetzt wird, sowie von organischen und silicatischen Liganden, die aus der Beton- bzw. Zementkorrosion der technischen Barriere resultieren. Deshalb soll der Einfluss von Eisen sowie der organischen und silicatischen Liganden auf die Radionuklidrückhaltung an Zementkorrosionsphasen und dem Bentonitpuffer unter hyperalkalinen Bedingungen bei mittleren bis hohen Ionenstärken quantifiziert werden. Dazu werden die Prozesse Sorption, Diffusion, Komplexierung, Redoxtransformation und Löslichkeit mit experimentellen und quantenchemischen Methoden untersucht und mithilfe von thermodynamischen Modellen beschrieben. Die zu erwartenden wissenschaftlichen Ergebnisse werden den grundlegenden Kenntnisstand auf dem Gebiet der geochemischen Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen deutlich erweitern und tragen damit direkt zur Optimierung einer thermodynamisch fundierten Sicherheitsanalyse zur Langzeitsicherheit von nuklearen Endlagern bei. Des Weiteren werden wichtige grundlegende Erkenntnisse bezüglich des Komplexierungsverhaltens von Actiniden erhalten, die auch in anderen wissenschaftlichen Bereichen von besonderer Bedeutung sind.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP 2.1 Komplexierung von Actiniden mit ausgewählten organischen Referenzliganden

AP 2.2 Komplexierung von Actiniden mit ausgewählten Zementadditiven

AP 2.3 Wechselwirkung von Actiniden mit silicatischen Systemen: Speziation und Thermodynamik

AP 3 Nachwuchsförderung im Bereich der nuklearen Entsorgung

AP 4 Transfer der Erkenntnisse und Integration der Ergebnisse für den Sicherheitsnachweis

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Rahmen von AP 2.2 wurde die Komplexierung von Cm(III) und Eu(III) mit dem kommerziell erhältlichen PCE Superplasticizer *Glenium® 51* (BASF) bei unterschiedlichen Ionenstärken im NaCl-Medium mittels zeitaufgelöster Laserfluoreszenzspektroskopie (TRLFS) untersucht. Dabei sollte geklärt werden, welchen Einfluss erhöhte Ionenstärken auf diese Komplexierungsreaktionen haben. Anhand der Fluoreszenzspektren von Cm(III) und Eu(III) wurden zunächst die Speziesanteile der komplexierten und nicht-komplexierten Spezies als Funktion der *Glenium® 51*-Konzentration bestimmt. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen zeigten, dass beide Metallionen mit *Glenium® 51* 1:1-Komplexe bilden, was anhand von Steigungsanalysen bestätigt wurde. Mithilfe des Ladungsneutralitätsmodells wurden die Stabilitätskonstanten für verschiedene Ionenstärken im Bereich von 0.1 – 2.5 m bestimmt. Die Stabilitätskonstante des Eu(III)-Gle Komplexes beträgt für eine Ionenstärke von  $I_m=0.1 \log \beta = 7.5 \pm 0.8$  und steht in exakter Übereinstimmung mit dem einzig verfügbaren Literaturwert. Für höhere Ionenstärken und für die Komplexierung von Cm(III) mit *Glenium® 51* existierten bis dato keine Literaturwerte.

Anhand dieser Ionenstärkeabhängigen Komplexierungsuntersuchungen konnte gezeigt werden, dass mit Erhöhung der Ionenstärke die Anteile an gebildetem Komplex und damit die Stabilitätskonstanten für die Komplexierungsreaktionen abnehmen. Die Stabilitätskonstante des Eu(III)-Gle-Komplexes nimmt dabei im untersuchten Ionenstärkebereich um 2.6 Größenordnungen ab, während sich die des Cm(III)-Gle-Komplexes im Vergleich um 0.6 Größenordnungen verringert. Somit ist ersichtlich, dass erhöhte Ionenstärken in einem Endlager durchaus einen signifikanten Einfluss auf die Komplexierung mit polymeren organischen Zementbestandteilen haben.

Im nächsten Schritt wurden dann auf der Basis dieser Ionenstärkeabhängigen Daten durch Anwendung des SIT-Modells die Stabilitätskonstanten ( $\log \beta^0$ ) bei der Ionenstärke  $I_m = 0$  sowie die Ioneninteraktionskoeffizienten  $\Delta \epsilon$  für die Reaktionen von Eu(III) und Cm(III) mit *Glenium® 51* bestimmt. Diese Daten können in Datenbasen eingepflegt werden und dienen einer zukünftigen Extrapolation der Stabilitätskonstanten der untersuchten Reaktionen auf beliebige Ionenstärken eines zu betrachtenden möglichen Endlagerstandorts.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Kinetische Untersuchungen zur Wechselwirkung von Cm(III) mit Silicaten als Funktion des pH-Wertes.

Speziationsuntersuchungen der Wechselwirkung von An(III)/Ln(III) mit polymeren Polycarboxylat-Superplasticizern als Funktion von Ionenstärke und Temperatur.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Bachelorarbeit (Raoul Gillmeister): „Komplexierung von Cm(III) und Eu(III) mit dem Superplasticizer *Glenium®51* in Abhängigkeit der Ionenstärke“, Universität Heidelberg, 15.05.– 12.07.2024.

S. Özyagan, T. Sittel, P. J. Panak, Complexation of Cm(III) with monosilicic acid in chloride media“ – to be submitted.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11870A
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren II (UMB-II)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2021 bis 30.06.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.226.887,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Artur Meleshyn	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Ziele des Verbundvorhabens sind: 1. Aufklärung des Mechanismus der Zersetzung von Karbonaten und CO<sub>2</sub>-Freisetzung in Bentoniten, 2. Bestimmung der Gründe für die beobachtete Acidität der Bentonite bei erhöhten Temperaturen, 3. Beitrag zur Aufklärung des Lösungs- bzw. Umwandlungsmechanismus der Smekтите in Bentoniten, 4. Beitrag zur Aufklärung der Metallkorrosion durch Wechselwirkung mit Bentoniten mit/ohne mikrobiellen Einfluss unter Einsatz von optimierter Mössbauerspektroskopie, 5. Mechanistisches Verständnis der Fe(II)/Fe(III)-Redoxreaktion strukturellen Eisens in Smektiten auf atomarem Niveau mit Hilfe von quantenchemischen Modellierungen.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Zum Erreichen der oben genannten Ziele sind aufeinander abgestimmte experimentelle und analytische Arbeiten in den Laboren der Verbundprojektpartner sowie quantenchemische Modellierungen und geochemische Modellierung vorgesehen. Im AP 1 „Zersetzung von Karbonaten und CO<sub>2</sub>-Freisetzung“ (Federführung: GRS) sollen dafür im GRS-Labor Versuche mit Bentoniten, reinen Mineralphasen und aus diesen hergestellten Mineralgemischen in Metallzylindern bei 120°C sowie anschließende Gasanalysen und Bestimmungen der Karbonatgehalte, pH-Werte und Zusammensetzungen der Kontaktlösungen durchgeführt werden. Die Versuche und ihre Auswertung sollen durch die unterstützende geochemische Modellierung begleitet werden. Im AP 6 koordiniert die GRS die Arbeiten im Verbundprojekt.

### **3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse**

Im Berichtszeitraum wurde die Durchführung der Versuchsreihe zur Ermittlung der Abhängigkeit der Karbonatzersetzungsrate mit 10 Karbonatmineralen in Kontakt mit reaktiven Mineralphasen Pyrit und Quarz abgeschlossen. Diese Versuchsreihe wurde mit Glasreaktoren der Fa. Büchi durchgeführt, die ein deutlich verbessertes Handling der Versuche und der Gasprobenahme ermöglichen. Drei restliche Versuche der 10 Versuche und die Analysen der in Versuchen freigesetzten Gase wurden abgeschlossen.

Es wurde bei der Auswertung einer im Jahr 2023 durchgeführten Versuchsreihe eine Abweichung bei der Durchführung festgestellt, die eine Wiederholung der Messreihe erfordert. Die Vorbereitungen für die Wiederholung wurden getroffen. Um die Bearbeitung der Versuchsreihen zu beschleunigen, wurden fünf weitere Büchi-Glasreaktoren und ein sie bedienender Magnetrührer bestellt. Aufgrund der Verzögerungen im Laborbetrieb und der längeren Lieferzeiten kam es zu einer entsprechenden viermonatigen Verzögerung bei der Projektdurchführung. Als eine weitere Maßnahme zur Beschleunigung der Bearbeitung des Arbeitsplans wurde beschlossen, die Temperatur der Versuche auf 140 °C anzuheben. Die Versuchsdauer wird damit auf zwei Wochen reduziert.

Die Koordination des Verbundprojektes bestand in der Organisation des siebenten Präsenzworkshops, welches am 19.-20. Juni 2024 durch die GRS in Braunschweig ausgerichtet wurde.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Abschluss der laufenden Versuchsreihe, Vorbereitungen und Beginn der weiteren Versuchsreihen im AP1; Organisation des achten Projektworkshops im AP6.

### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Keine

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Helmholtz-Zentrum Dresden – Rossendorf e. V. Institut für Ressourcenökologie		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11870B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2021 bis 30.06.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 683.825,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Nicole Matschiavelli	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Bentonit-basierte Nahfeldbarrieren können in einem Endlager für hoch-radioaktive Abfälle aufgrund erhöhter Temperaturen und einer Wechselwirkung mit wässrigen Lösungen aus dem umliegenden Wirtsgestein eine für die Langzeitsicherheit des Endlagers relevante Umwandlung erfahren. Im Projekt UMB wurde festgestellt, dass bei 25, 90 und 120°C eine erhebliche pH-Absenkung sowie eine CO<sub>2</sub>-Gasbildung durch eine teilweise bis vollständige Zersetzung der in Bentoniten vorhandenen Karbonate ablaufen kann. Im Projekt UMB-II sollen die beteiligten Reaktionsmechanismen aufgeklärt werden. Weitere Arbeitsschwerpunkte sind (i) die Abhängigkeit der Lösungsrate der Smektite vom Bentonit-Typ, (ii) der Einfluss der Fe(II)/Fe(III)-Redoxreaktion (experimenteller und quantenchemischer Ansatz), (iii) die Unterschiede in Korrosionsraten und –Produkten an einer Eisen-Bentonit-Grenzfläche (mit Einsatz einer zu optimierenden Mössbauerspektroskopie) und (iv) der Einfluss der Bentonit-eigenen mikrobiellen Population. Die unter (iv) genannten mikrobiellen Arbeiten werden am HZDR durchgeführt. Hierzu werden Mikrokosmen angesetzt, welche mit einem Bentonit (B27 oder GMZ), synthetischer Opalinuston-Porenlösung (OPA) und Gusseisenplättchen (Typ GGG40) versehen werden. Die Ansätze inkubieren für mindestens ein Jahr jeweils bei 37 und 90°C mit und ohne Zugabe von Wasserstoff.

### Beziehung zu anderen Vorhaben

Innerhalb der Kooperationspartner (Förderkennzeichen 02E11870)

- Leibniz Universität Hannover, Institut für anorganische Chemie
- Leibniz Universität Hannover, Institut für Bodenkunde
- Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Bereich Endlagerforschung, Braunschweig
- Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Arbeitsbereich Technische Mineralogie, Hannover
- Ernst-Moritz-Arndt-Universität Greifswald, Institut für Geographie und Geologie, Greifswald
- Technische Universität München, Lehrstuhl für theoretische Chemie

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Die Thematik des UMB-II Projektes wird in 6 Arbeitspaketen (AP) bearbeitet, wobei das HZDR an der Bearbeitung des AP 4 „Metallkorrosion in Bentoniten mit/ohne mikrobiellen Einfluss“ beteiligt ist.

1. Ansetzen und Beprobungen von Mikrokosmen über einen Zeitraum von Mindestens 12 Monaten
2. Bestimmung bio-geochemischer Parameter (z.B. pH-Wert,  $E_h$ , Fe(II/III) in Mikrokosmen
3. Extraktion von DNA aus inkubierten Mikrokosmen und Bentonit-Ausgangsmaterialien
4. Bestimmung mikrobieller Diversität (PCR, RISA, Sequenz-Analyse)
5. Mikroskopische Analyse der Gusseisen-Korrosion mittels SEM-EDX
6. Ggf. Anreicherung von Mikroorganismen aus inkubierten Mikrokosmen

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die mikrobielle Population der Bentonite B27 und GMZ-001 und deren Einfluss auf die Korrosion von Gusseisenplättchen (Typ GGG40) soll mit Hilfe von Mikrokosmen analysiert werden. Die anaeroben Ansätze enthalten einen der beiden Bentonite, Gusseisenplättchen und synthetische Opalinuston-Porenlösung. Für die Simulation einer beginnenden Korrosion, werden einige Ansätze mit Wasserstoff versehen. Kontrollansätze beinhalten zweifach autoklavierten Bentonit. Die Mikrokosmen inkubieren jeweils bei 30 und 70°C und werden im Verlauf des Projektes beprobt.

Nach 994 Tagen Inkubation erfolgte die sechste Beprobung der Mikrokosmen. Ähnlich zu den vorherigen Beprobungen, zeigten B27-Ansätze, welche bei 37°C inkubiert wurden, deutliche Anzeichen für mikrobielle Aktivität. So nahm beispielsweise die Sulfat- und Wasserstoff-Konzentration ab, was auf die Aktivität von Sulfat-reduzierenden Bakterien hindeutet (SRB). Die DNA konnte aus den entsprechenden Ansätzen (811 Tage Inkubation) erfolgreich isoliert und sequenziert werden. In allen Ansätzen dominierten sporenbildende SRB für welche die Nutzung von Sulfat mit Wasserstoff als Elektronen-Donor bereits beschrieben wurde. Insgesamt konnte die DNA aus 16 Proben, welche bei 37°C inkubiert wurden, erfolgreich isoliert werden. Hiervon konnten 9 Proben erfolgreich sequenziert werden. In allen Proben, welche eine deutliche Abnahme von Sulfat zeigten, konnte die Dominanz von SRBs nachgewiesen werden – unabhängig vom Bentonit-Typ. Jedoch dominierten in B27-Mikrokosmen SRBs, welche verschieden waren zu den SRBs in den entsprechenden GMZ-001-Mikrokosmen.

Gusseisenplättchen, welche in B27-Ansätzen bei 37°C inkubiert wurden, zeigten ein Präzipitat, welches potentiell als Passivierungsschicht fungieren könnte. Die Analyse mittels XRD an der Universität Greifswald, identifizierte Calcit als Hauptbestandteil dieser Schicht. In entsprechenden sterilen Ansätzen konnte diese Calcit-Schicht nicht nachgewiesen werden. Die Sterilisation des B27-Bentonits könnte sich daher auf die Gusseisenkorrosion auswirken. Ein Zusammenhang zwischen mikrobieller Aktivität und der Bildung der Calcit-Schicht ist hierbei möglich.

Alle Bentonit-Proben wurden getrocknet und an die jeweiligen Kooperationspartner zur Analyse übergeben (Uni Greifswald und Uni-Hannover).

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im 8. Berichtszeitraum ist die Extraktion und Sequenzierung der DNA aus allen t5-Proben, welche bei 37°C inkubiert wurden, geplant (994 Tage Inkubation). Nach etwa 1200 Tagen Inkubation soll die letzte Beprobung der Mikrokosmen stattfinden.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

#### Publikationen:

Bisher keine

#### Vorträge:

*Matschiavelli, N.*, **Microbial Influence on Cast Iron Corrosion under Repository-Relevant Conditions**; 7<sup>th</sup> project meeting UMB-II, Braunschweig, 19.-20.06.2024.

#### Poster:

Keine in diesem Berichtszeitraum

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Universität Greifswald, Domstr. 11, 17489 Greifswald		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11870C</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren- Phase II (UMB II), Tielprojekt C		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2021 bis 30.06.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 319.520,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. L.N. Warr	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Die Arbeitsschwerpunkte (AP3) der Universität Greifswald sind die Veränderungen der Smektitzusammensetzung sowohl in natürlichen als auch in synthetisch gemischten Bentonitproben. Die Reaktionsmechanismen der Smektitänderungen werden in mineralogischen und geochemischen Vergleichsstudien untersucht. Zusätzlich wird der Einfluss verschiedener akzessorischer Mineralien (AP1, AP3), bei der CO<sub>2</sub>-Freisetzung (AP2), pH Änderung und zum Redoxzustand (AP2) bestimmt. Änderungen der Smektitzusammensetzung werden auch in Bezug auf mikrobielle Aktivität (AP4) sowie der Korrosion des Fe-Metallkanisters (AP5) untersucht.

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP-Nr. 3.1: "Reinigung und Analyse von Smektitproben und anderen Mineralen"

AP-Nr. 3.2: "Mischung und Charakterisierung von synthetischen Bentonitproben für Batch-Reaktor-Experimente an GRS, UG und BGR"

AP-Nr. 3.3: "Monitoring und mineralogische/geochemische Analysen der Experimente (XRD, XRF, CEC usw.)"

AP-Nr. 3.4: "Weitergehende Analyse von Batch-Experimenten und Datenanalysen"

AP-Nr. 3.5: "Elektronenmikroskopische Untersuchung der Versuchsprodukte"

AP-Nr. 3.6: "Datenanalyse und Vergleich von synthetischen Bentoniten mit natürlichen Mischungen"

AP-Nr. 3.7: "Auswertung (Mechanismen)"

AP-Nr. 3.8: "Berichte"

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Alle Proben wurden mit TEM-EDX mit der verbesserten Methode von Warr et al. (in press), welche in diesem Projekt entwickelt wurde, analysiert. Dadurch konnten präzisere Schichtladungen von Einzelpartikel bestimmt werden als mit den bisher veröffentlichten Methoden. Darüber hinaus konnten mit dem TEM Elektronbeugung an einzelnen Partikeln sowie eine hochauflösende Bilder der Gitterebenen gewonnen werden. Diese Informationen ermöglichten eine vollständigere Bestimmung der Kristallchemie und der Kristallformen der unterschiedlichen Reaktionsprodukte. In dieser Phase des Forschungsprojekts wurden alle Arbeitspakete von AP-Nr. 3.1 bis 3.7 vor der Projektverlängerung im Januar 2024 abgeschlossen und diese Ergebnisse werden in einem kommenden Artikel in Applied Clay Science veröffentlicht (Sudheer Kumar et al, in press).

Auf Grund der 18 monatigen Projektverlängerung, führen wir nun neue Batch-Reaktorexperimente bei niedrigeren und höheren Temperaturen mit unterschiedlichen Experimentdauern und K<sup>+</sup>-Konzentrationen (sowohl für KCl als auch für K-Oxalat) durch. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen sollen dazu dienen, die Reaktionskinetik und die

Raten der Smektitänderung mit und ohne organische Katalysatoren zu bestimmen. Dadurch wird die Möglichkeit der Stabilitätsvorhersage für langfristige Änderungen des Bentonits geschaffen. Abbildung 1 fasst den experimentellen Arbeitsplan für AP-Nr. 3.1 und 3.2 zusammen, wobei nur noch drei Batchläufe ausstehen.

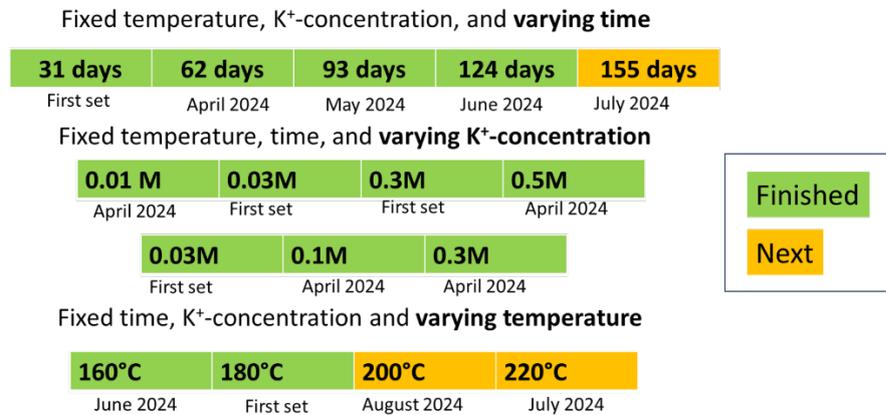


Abbildung 1: Projekt Plan für die kinetischen Untersuchungen

Zusätzlich haben wir auch TEM-EDX-Analysen, XRD-Messungen und Rietveld-Verfeinerungsquantifizierungen einiger Proben vom HZDR, Dresden, durchgeführt. Ziel war es, die Veränderung von Smektiten und die Bildung neuer Phasen im Zusammenhang mit längeren Perioden mikrobieller Aktivität in Bentoniten zu untersuchen. Alle unsere jüngsten Ergebnisse wurden auf dem 7. UMB-II-Halbjahrestreffen in Braunschweig (19./20. Juni 2024) vorgestellt.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

Zum einen werden wir weitere Proben vom HZDR, Dresden, untersuchen, genau wie oben erläutert. Zum anderen konzentrieren wir uns derzeit auf die Bestimmung der verschiedenen Illit-Polytype, die in den Batch-Reaktionsprodukten entstehen. Um diesen Teil der Studie zu ergänzen, untersuchen wir auch Illit-Standards im TEM, um die unterschiedlichen Kristallchemien der cis- und trans-Polytypenstrukturen zu erkennen und zu charakterisieren. Darüber hinaus erhalten wir weitere hochauflösende TEM-Bilder, um die Kristallwachstumsmechanismen der Reaktionsprodukte auf der Gitterebene besser zu verstehen. Nach den letzten Batch-Experimente werden die Proben nach unseren Standardprotokollen analysiert und die Ergebnisse zur Erstellung kinetischer Beziehungen verwendet. Dieser letzte Teil der Analysen wird 6-8 Monate in Anspruch nehmen. Der Abschluss der Analyse soll zu einer verbesserten Arrhenius-Reaktionsgeschwindigkeitsgleichung führen, die somit auf die Bentonitumwandlung anwendbar ist. Diese Ergebnisse würden die Vorhersage langfristiger Reaktionszustände und damit die Integrität von Barrieren in unterirdischen Endlagern erheblich verbessern.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Sudheer Kumar, R., Warr, L.N., Grathoff, G., Thombare, B.R., (Submitted). Advanced smectite alteration and the role of accessory reactants at 180°C: New experimental constraints on the stability of bentonite. *Applied Clay Science*.

Warr, L.N., Thombare, B., Sudheer Kumar, R., Peltz, M., Podlech, C., Grathoff, G.H. (submitted). Determining the stoichiometric composition of Wyoming montmorillonite using improved transmission electron microscopy - energy dispersion X-ray (TEM-EDX) techniques. *Clays and Clay Minerals*.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Technische Universität München		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11870D</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbund Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren (UMB) Teilprojekt D: Fe(II)/Fe(III)-Redoxreaktion auf atomarem Niveau in Smektiten		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2021 bis 30.06.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 339.641,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. S. Krüger	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Vorhabensziele:

- Quantenmechanische Modellierung von Fe(II)-Substitutionen in Smektiten
- Abschätzung des Redoxpotentials von Eisensubstitutionen in Smektiten

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm umfasst folgende Arbeitspakete (AP):

1. Methoden und Modelle
2. Fe(II) in Smektiten
3. Fe(II) in und an Smektitoberflächen
4. Zwischenschichtionen in Smektiten
5. Eisenkorrosionsphasen

Die zentralen Themen des Projektes sind die rechnerische Modellierung von Fe(II)-Substitutionen in Smektiten (AP 2) in Abhängigkeit von Struktur, Ladung und anderer Substitutionen sowie die Abschätzung entsprechender Redoxpotentiale für Fe(II)/Fe(III). Weiterhin werden Fe(II)-Substitutionen in Oberflächen von Smektiten sowie die Sorption von Fe(II) an Oberflächen untersucht (AP 3), um Fe(II) in Smektiten umfassend zu charakterisieren. Daneben ist vorgesehen, Solvation und Koordination von Zwischenschichtionen, die geladene Substitutionen wie Fe(II) kompensieren, zu untersuchen. Mit der Berechnung relativer Energien von Eisenkorrosionsphasen werden Arbeiten der Projektpartner unterstützt.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP 1: Modelle und Methoden; AP 2 Fe(II) in Smektiten; AP 4: Zwischenschichtionen in Smektiten

Neben den als bevorzugt zu erwartenden antiferromagnetischen Spinanordnungen zweier Eisensubstitutionen in Smektitmodellen wurden auch ferromagnetische Anordnungen systematisch für zwei Substitutionen in Pyrophyllit untersucht (AP 1). Für Fe(III) und Fe(II) wurde wie erwartet nur ein Effekt bei benachbarten Substitutionen gefunden. Für den Spezialfall einer Fe(II)- und einer Fe(III)-Substitution ergab sich eine unerwartete Stabilisierung, die weiterer Untersuchungen bedarf.

Rechnungen zu oktaedrischen Eisensubstitutionen in Smektiten wurden auf cis- und transvakanten Beidellit erweitert (AP 2) und damit für wasserfreie Modelle im Wesentlichen abgeschlossen. Die tetraedrische Al(III)-Substitution des Beidellits führt zu einem relativ stark bevorzugten transvakanten Gitter. Die Position ladungskompensierender Na-Zwischenschichtionen neben dieser Substitution muss optimiert werden, da ihre Energie um bis zu 100 meV variiert (AP 4). Abweichend von anderen Smektiten ist oktaedrisches Fe(III) neben der tetraedrischen Substitution in Beidellit am stabilsten und Fe(II) als übernächster oder weiter entfernter Nachbar. Damit ergibt sich eine etwas geringere Variation des Reduktionspotentials von Eisen im Vergleich mit Montmorillonit und Fe(II)-substituiertem Pyrophyllit von etwa 300 mV je nach Substitutionsposition. Der Vergleich mit Eisen in ladungsneutralem Pyrophyllit bestätigt den unerwarteten Befund, dass geladene oktaedrische Substitutionen die Reduktion von Fe(III) etwas erleichtern auch für Beidellit.

Die mit Proberechnungen an transvakantem Pyrophyllit begonnenen Rechnungen zur Reduktion von oktaedrischen Fe(III)-Substitutionen durch Wasserstoff wurden systematisiert und auf cisvakanten Pyrophyllit sowie Montmorillonit erweitert (AP 2). Für alle untersuchten Modellsmektite ist die Absorption von H<sub>2</sub> in der Zwischenschicht leicht endotherm (< 25 kJ/mol), wobei transvakante Gitter bevorzugt werden. Na-Zwischenschichtionen wirken repulsiv auf H<sub>2</sub>. Eine Verlagerung des Wasserstoffs in die Smektitschicht erwies sich als stärker endotherm (≈ 75 kJ/mol). Wasserstoffatome in Smektitmodellen führen unmittelbar zur Reduktion von Fe(III). Wasserstoff lagert sich dabei bevorzugt an OH-Gruppen neben Fe(II) an und bildet einen verbrückenden Wasserliganden. Unabhängig vom Smektitmodell und dem Gittertyp zeigen Sorptionsplätze für ladungsausgleichendes H<sup>+</sup> an Sauerstoffatomen die Energieordnung FeOAl < Mg-O-Al < Al-O-Al < Si-O-Si in der Smektitschicht und an ihrer (001)-Oberfläche. Neben Mg-Substitutionen wird wie neben Fe(II) ein verbrückender Wasserligand bevorzugt statt einer OH-Gruppe gebildet. Die Bildung von Wasserliganden durch Anlagerung von H<sup>+</sup> als Folge der Reduktion von Eisen kann als erster Schritt einer Dehydratisierung und damit einer irreversiblen Strukturveränderung gesehen werden. Dieser Schritt dürfte jedoch stark exotherm sein. Eine Versuchsrechnung an cisvakantem Pyrophyllit mit einer oktaedrischen Eisensubstitution ergab für eine Verlagerung eines Wasserliganden neben Fe(II) in die Zwischenschicht etwa +100 kJ/mol. Ein Vergleich der Eisenreduktion durch H<sub>2</sub> in Pyrophyllit und Montmorillonit zeigt, dass diese etwas leichter in transvakanten Gitterstrukturen ist. Dieser Vergleich ergab weiterhin, dass das Reduktionspotential in schichtgeladenen Montmorillonitmodellen (q = -0.25 e) etwas niedriger als in ungeladenem Pyrophyllit ist. Damit ist dieser Effekt unabhängig von der Art der Reduktion bestätigt. Diese approximative Resultate sollen noch durch thermodynamische Korrekturen verbessert und bestätigt werden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP 1: Modelle und Methoden; AP 2: Fe(II) in Smektiten; AP 4: Zwischenschichtionen in Smektiten

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11870E</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren II – Phase II (UMB II), Teilprojekt E		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2021 bis 30.06.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 331.363,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Renz	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Bentonit-basierte Nahfeldbarrieren können in einem Endlager für hoch-radioaktive Abfälle aufgrund erhöhter Temperaturen und einer Wechselwirkung mit wässrigen Lösungen aus dem umliegenden Wirtsgestein eine für die Langzeitsicherheit des Endlagers relevante Umwandlung erfahren. Im Projekt UMB wurde festgestellt, dass bei 25, 90 und 120°C eine erhebliche pH-Absenkung sowie eine CO<sub>2</sub>- Gasbildung durch eine teilweise bis vollständige Zersetzung der in Bentoniten vorhandenen Karbonate ablaufen kann. Im Projekt UMB-II sollen die beteiligten Reaktionsmechanismen aufgeklärt werden. Weitere Arbeitsschwerpunkte sind (i) die Abhängigkeit der Lösungsrate der Smektite vom Bentonit-Typ, (ii) der Einfluss der Fe(II)/Fe(III)-Redoxreaktion (experimenteller und quantenchemischer Ansatz), (iii) die Unterschiede in Korrosionsraten und –produkten an einer Eisen-Bentonit-Grenzfläche (mit Einsatz einer zu optimierenden Mößbauerspektroskopie) und (iv) der Einfluss der Bentonit-eigenen mikrobiellen Population.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1: Mößbauerspektroskopische Messungen und Auswertungen von Bentonitmaterialien zur Aufklärung des Fe(II)/Fe(III) Verhältnisses aus den Versuchen der anderen Projektteilnehmer (Speziation)

AP2: Analytischer Beitrag zur Korrosionsratenbestimmung an der Eisen-Bentonit-Grenzfläche.

AP3: Optimierung der Methoden in der Mößbauerspektroskopie zur Verbesserung der Messergebnisse.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1 & AP2: Durch die Messung neuer Proben sollte ein besseres Verständnis für die Temperaturabhängigkeit der chemischen Prozesse gewonnen werden. Der Einfluss von Fremdphasen (Opal, Calcit) auf den Korrosionsprozess wurden ebenfalls untersucht. Es wurden interessante Beobachtungen in Bezug auf den Korrosionsfortschritt bei nicht vorhandener Wasserstoffbildung gemacht.
- AP3: Transimpedanzverstärkerschaltung wurde zu Photodiodenverstärkerschaltung (PDV-Schaltung) erweitert und erzielt simulativ wie auch experimentell bessere Ergebnisse als bisherige Schaltungsentwicklungen im Projekt. Aktuell werden Testmessungen durchgeführt. Neue Methode zur Stabilitätsbeurteilung technischer Systeme wurde im Zuge der Robustheitsanalyse entwickelt. Erste Stabilitätsanalysen mit positivem Ergebnis.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1 & AP2: Es sollen weitere Mößbauermessungen für die BGR, das HZDR sowie die Universität Greifwald aufgenommen und ausgewertet werden. Das Phänomen der Korrosion ohne die Bildung von Wasserstoff soll weiter untersucht werden.
- AP3: PDV-Schaltung wird hardwareseitig weiter optimiert und weitere Messungen folgen. Praktische Optimierung der Schaltung in Bezug auf SNR und Reaktionsgeschwindigkeit ist zu erwarten. Darauf aufbauend weitere Optimierung der Simulationsmodelle. Weitere Messungen in Bezug auf die neue Stabilitätsnachweismethodik.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

“TWO-DIMENSIONAL MÖSSBAUER SPECTROMETER BASED ON ARDUINO TECHNOLOGY”, *Moritz Jahns, Justus Pawlak, Stephen Klimke, Ralf Sindelar, Ulrich Schrewe, Robert Patzke, Franz Renz*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A, 1031(2022).

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Institut für Erdsystemwissenschaften, Abteilung Bodenkunde, Leibniz Universität Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11870F</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt F		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2021 bis 31.12.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 347.200,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> PD Dr. Stefan Dultz	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In dem Vorhaben soll die Bewertung der Stabilität geotechnischer Bentonitbarrieren verbessert werden. Hierfür werden im Verbund mit weiteren Kooperationspartnern aufeinander abgestimmte experimentelle und analytische Arbeiten durchgeführt um ausgewählte Aspekte der Umwandlung von Bentonit im Kontakt mit Formationswässern der geologischen Barriere unter Endlagersystem-nahen Bedingungen zu untersuchen. Insbesondere wird die Auflösung von Carbonaten und CO<sub>2</sub>-Freisetzung, Entstehung von Acidität und Mechanismen der Protonenpufferung, Metallkorrosion in Kontakt mit Bentoniten und die Bedeutung der Adsorption von Fe an Kantenflächen der Tonminerale für deren Löslichkeit untersucht.

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1: Auflösung von Carbonaten und CO<sub>2</sub>-Freisetzung  
 AP2: Acidität der Bentonite bei erhöhten Temperaturen  
 AP3: Lösungs- und Umwandlungsmechanismus der Smektite in Bentoniten  
 AP4: Metallkorrosion in Bentoniten mit/ohne mikrobiellen Einfluss  
 AP5: Fe(II)/Fe(III)-Redoxreaktion auf atomarem Niveau

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Die Quantifizierung der Umwandlung von Fe-haltigen Schwermineralen in tomographischen Aufnahmen aus der von der GRS erhaltenen Zeitreihe zu zwei Bentoniten bei 120°C und 2 bar wurde wieder aufgenommen. Die Methode zur Quantifizierung dieser Phasen mit Anzahl, äußerer Oberfläche und Volumen ist fertig entwickelt. Allein die bildliche kontrastreiche Darstellung einzelner Minerale zur Kennzeichnung der Auflösungsmikromorphologie wird noch verbessert. Für die tomographische *in situ* Untersuchung der Gasentstehung in hochverdichteten Bentoniten, wo die grundsätzliche Möglichkeit der Visualisierung an gering verdichteten Bentoniten in zurückliegenden tomographischen Untersuchungen aufgezeigt werden konnte, wurde ein Antrag auf Messzeit an der röntgentomographischen Strahllinie der Synchrotroneinrichtung DESY in Hamburg gestellt. Dieser wurde jedoch nicht bewilligt.

AP2: Um den an die Fe-Freisetzung gebundenen potentiellen Versauerungsbeitrag von in den Bentoniten vorkommenden Tonmineralen und Schwermineralen vergleichend zu bewerten, wurden diese durch Dichtefraktionierung bei 2,9 g cm<sup>-3</sup> getrennt und in einem

Berghof Druckaufschlusssystem bei 110°C und zum Vergleich bei 20°C in Oxidationsversuche eingesetzt. Die freigesetzten Mengen an Fe, Al, Mn und Si in der überstehenden Lösung sowie durch Extraktion der Festphase mit Dithionit-Citrat-Bicarbonat wurden bestimmt. Diese Arbeiten wurden für die ursprünglichen Bentonite und die Leichtfraktion abgeschlossen. Es zeichnet sich eine kurzfristig hohe Reaktivität der Schwermineralfraktion ab. Die mikroskopische Untersuchung von Schwermineralen an Dünnschliffen an einem Mikroskop mit Laser-basierte chemischer Analyseeinheit zeigt einerseits einen geringen Fortschritt oxidativer und lösungschemischer Verwitterung in den Bentoniten an, zum anderen weisen deutliche verwitterungsbedingte Alterationen auf die hohe Reaktivität dieser Mineralphasen hin.

AP3: Im Nachgang zum Workshop an der GRS im Juni wurde die Untersuchung von Bentonitproben aus BGR-Probenreihen zur H<sub>2</sub>-Gasentstehung nach der Dithionit-Citrat-Bicarbonat-Extraktionsmethode mit Quantifizierung von löslichem Fe, Al, Mn und Si vereinbart.

AP4: Vom HZDR wurden 30 Bentonitproben und zugehörige Fe-Plättchen aus Mikrokosmenversuchen in der Zeitreihe nach 994 Tagen erhalten. Hier wurde nach bestehendem Verfahren die Quantifizierung des Korrosionsumsatzes der Fe-Plättchen fortgeführt. Es wurde DCB-lösliches Fe, Al, Mn und Si extrahiert und am ICP-OES quantifiziert. Durch diese Extraktion wird der Umfang der Korrosion der Plättchen über die in Lösung gebrachten Fe- und Mn-Mengen auch weiterhin sehr gut quantitativ wiedergegeben. Der Gehalt an Fe-Oxiden in den Bentoniten liegt durch die Korrosion der Plättchen zum Teil bei weit über 50%. Aus dem Verlauf der extrahierbaren Fe-Mengen in der Zeitreihe wird ersichtlich, dass diese zum Teil rückläufig sind. Als mögliche "Senke" kommt die Neubildung von Mineralphasen aber auch die Aufnahme von Fe in den Zwischenschichtraum von Montmorillonit in Betracht.

AP5: keine Arbeiten im Berichtszeitraum

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Auswertung der tomographischen *ex* und *in situ* Aufnahmen hinsichtlich Mineralumsatz und Gasentwicklung. Erneute Antragstellung zur *in situ* tomographischen Untersuchung der Mikromorphologie der Gasentwicklung bei mittel und stark verdichteten Bentoniten gleich Anfang 2025.

AP2: Untersuchung der Versauerungsreaktion mit anschließender DCB-Extraktion an der schweren Dichtefraktion der Bentonite zur Kennzeichnung des Beitrages von Tonmineralen gegenüber dem von Schwermineralen. Manuskripterstellung, Arbeitstitel: Acidification and CO<sub>2</sub>-degassing in bentonites triggered by oxidation of Fe(II)-containing minerals

AP3: Extraktionen von Bentonitproben hinsichtlich der Quantifizierung sekundär gebildeter Oxidphasen in BGR-Versuchsreihen.

AP4: Weiterführung der Rauigkeitsuntersuchungen an vom HZDR erhaltenen Fe-Plättchen in der Zeitreihe zur Kennzeichnung der Mikromorphologie der Korrosion. Untersuchung der Veränderung der Oberflächenladung und Matrixstabilität der Tone durch Fe-Transfer. DCB-Extraktion an Tonproben an weiterer (und letzter) Zeitstufe) der HZDR Versuchsreihe.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Im diesem Berichtszeitraum wurden keine Publikationen veröffentlicht.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11880</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Sicherheitsrelevante Untersuchungen zur Bentonitaufsättigung (SIRUB)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2021 bis 30.09.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.356.372,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Klaus-Peter Kröhn	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Im Zusammenhang mit der Wasseraufnahme von Bentonit/-barrieren ist immer noch eine Reihe von Fragen offen. Den folgenden Fragen soll im Projekt SIRUB nachgegangen werden:

a) Wie entwickelt sich die schmale, vollaufgesättigte Zone am Bentonit-Wasser-Kontakt?

Motiviert durch Beobachtungen im Projekt EBS (FKZ 02E9430 (BMWA), GRS-199)

b) Wie quillt Bentonit in einen begrenzt freien Raum?

Motiviert durch Mitarbeit in der Task Force EBS, Projekt WiGru-9 (FKZ 02E11941 (BMWi), laufend) und einen Demonstrationsversuch mit Pellets im EU-Projekt BEACON

c) Können Einheitsisothermen aus Montmorillonitgehalt und Kationentyp abgeleitet werden?

Motiviert durch beobachtete Unterschiede in Na- und Ca-Bentonit, Projekt BIGBEN (FKZ 02E11284 (BMWi), GRS-615)

d) Welche Endporositäten werden nach voller Aufsättigung mit Wasserdampf erreicht?

Motiviert durch neuerliche Auswertung der Versuche im Projekt EBS (s.o.) im Projekt WiGru-7 (FKZ 02E11102 (BMWi), GRS-503)

e) Mit welcher Dynamik wird Wasser aus Klüften im Kristallin in den Buffer eingetragen?

Ergänzung der Task 8 „Buffer-Rock Interaction“ der Task Forces EBS und GWFTS mit Blick auf die Fließvorgänge in einer Kluft, BMWi-Projekte E-DuR, WiGru-6, A-DuR, WiGru-7, QUADER (FKZ 02E10336, 02E10548, 02E10558, 02E11102 und 02E11213, GRS-430)

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Vorhabens werden folgende Arbeitspakete bearbeitet:

AP 1: Vorbereitende Arbeiten

AP 2: Aufsättigung am Bentonit-Wasser-Kontakt

AP 3: Begrenzt freie Quellung

AP 4: Einheitsisothermen

AP 5: Endporosität nach der Aufsättigung über Dampf

AP 6: Interaktion von Grundwasser und Bentonit im Kristallin

AP 7: Erstellung des Abschlussberichts

### **3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse**

Zu AP1: Bei der Überprüfung verschiedener Gläser für das Beobachtungsfenster auf ihre Eignung wurde festgestellt, dass der erforderliche Abstand zur Probe so groß wurde, dass auch ohne Glas kein signifikanter Messwert aufgenommen werden konnte. Daraufhin wurden Linsen beschafft, um den Brennpunkt des Sensors zu verschieben. Erste Messungen zeigen vielversprechende Ergebnisse.

Zu AP 4: Bentonitmaterial der BGR zur Ergänzung der bereits durchgeführten Messungen der Adsorptions- und Desorptionsisothermen wurde problemlos zur Verfügung gestellt. Zu entsprechenden Messungen ist es jedoch immer noch nicht gekommen, weil das nach extrem langer Zeit aus der Wartung gekommene Messgerät beim Rückversand beschädigt worden war und erneut eingeschickt werden musste.

Zu AP5: Die Aufsättigungsmessungen über Wasserdampf und mit flüssigem Wasser zur Bestimmung der Endporosität wurden fortgesetzt. Der Zustand voller Aufsättigung ist jedoch noch nicht erreicht.

Zu AP6: Für die seitliche Abdichtung der Kluft zwischen den gedruckten Platten stellte sich einfach aufgebrachtes Klebeband als die wirkungsvollste Maßnahme heraus. Eine Messzelle wurde hergestellt. Die Kompaktion des Bentonits in der Zelle führte jedoch zu merklichen Deformationen, für deren Beseitigung Modifikationen an der Zelle erforderlich waren. Erste Messungen stehen nunmehr unmittelbar bevor.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- Messungen von Bentoniten mit definierten Wassergehalten zur Absicherung der Messmethode (AP1)
- Beginn der Aufsättigungsversuche (AP2 und AP3)
- Fortsetzung der Arbeiten zur Isothermenbestimmung für einen Mg-Bentonit (AP4)
- Fortsetzung der Aufsättigungsversuche über Dampf und Wasser (AP5)
- Durchführung erster Versuche (AP6)

### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

keine

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> BGE TECHNOLOGY GmbH		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11890A	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt A			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung C3.3. Werkzeuge der Sicherheitsanalysen			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.03.2021 bis 31.10.2024		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 492.526,40 EUR		<b>Projektleiter:</b> R. Paola León Vargas	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das vorliegende Projekt zielt auf die Entwicklung und den Test eines erweiterten dreidimensionalen Hoek-Brown-Stoffmodells ab, das in der Lage ist, anisotropes Festigkeitsverhalten speziell in einem mit mehreren Klüften durchzogenen Gebirgskörper zu berücksichtigen. Es geht darum, die Grenzbedingung so zu formulieren, dass die festigkeitreduzierenden Eigenschaften des jeweiligen Kluftsystems im Zuge des Integritätsnachweises adäquat berücksichtigt werden können. Das BARIK-Stoffmodell soll in zwei verschiedenen Computercodes implementiert und getestet werden. Dadurch können Ungenauigkeiten, die durch die Verwendung unterschiedlicher Codes entstehen, identifiziert und bewertet werden. Mithilfe dieses neuen Stoffmodells soll geprüft werden, ob die aktuelle Formulierung und Quantifizierung des Dilatanz-Kriteriums für kristalline Wirtsgesteine ausreichend ist, oder ob Änderungen oder Konkretisierungen mit Blick auf die Berücksichtigung anisotroper Festigkeitsverhalten vorgenommen werden. Das BARIK-Modell soll auch für die Modellierung fluid-gesättigter Gebirgsbereiche eingesetzt werden. In diesem Fall wird der Biot-Koeffizient als hydromechanischer Kopplungsparameter eingeführt, um den effektiven Spannungszustand des geklüfteten Gesteins zu ermitteln. Die Durchführung des Projektes erfolgt in enger Zusammenarbeit mit der Technischen Universität Bergakademie Freiberg.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Gemäß den oben genannten Zielen, sind die Arbeiten in diesem Vorhaben in folgende Arbeitspakete aufgeteilt:

- AP 1: Entwicklung des erweiterten Stoffmodells
- AP 2: Laborversuche zur Eigenschaftsbestimmung
- AP 3: Implementierung und Test
- AP 4: Anwendung und Bewertung
- AP 5: Dokumentation

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Rahmen des Arbeitspakets 3 (AP3) wurden während des Berichtszeitraums wichtige Fortschritte bei der Einführung des Stoffmodells BARIK in OpenGeoSys (OGS) realisiert. Die Implementierung des Stoffmodells in MFront wurde schrittweise bearbeitet und Fehler in der Kompilierung wurden behoben. Als Erstes wurde mit dem Test der Matriceigenschaften begonnen und anschließend mit den bisher noch nicht implementierten Schwächeflächen weitergemacht. Die korrekte Grundfunktionalität des implementierten Stoffmodells wurde anhand von einfachen Testfällen (Single Element Test) überprüft. Diese Tests werden üblicherweise verwendet, um sicherzustellen, dass das Materialmodell korrekt in MFront implementiert wurde (Verifizierung). In einem nächsten Schritt wurden die Schwächeflächen in das BARIK-Stoffmodell integriert. Hierfür wurden analog einfache Testrechnungen durchgeführt. Damit wurden alle Verifizierungsrechnungen vom mechanischen Teil des BARIK-Stoffmodells in OGS mittels MFront erfolgreich abgeschlossen.

Die Verifikationsberechnungen des in FLAC3D implementierten Materialmodells wurden ähnlich wie bei OGS fortgesetzt. Außerdem wurden Vergleiche mit analytischen Lösungen und Benchmark-Übungen realisiert. Diese Benchmark-Übungen sind standardisierte Tests aus dem FLAC3D Manual von ITASCA sowie Berechnungsbeispiele aus dem Paper von Dai et al. (2012)<sup>3</sup>. Diese fanden mit beiden Codes (FLAC3D und OGS) statt, um die Umsetzung des BARIK-Stoffmodells zu überprüfen. Die Ergebnisse haben die erfolgreiche Umsetzung bestätigt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP 3: Einführung des Biot-Koeffizienten als hydromechanischer Kopplungsparameter in OGS mittels MFront.
- AP 3 und AP 4: Fortführung und Abschluss der Validierungsrechnungen mit FLAC3D und OGS
- AP 4: Anwendung des BARIK-Stoffmodells in kleinen Modellen zur Überprüfung des Dilatanzkriteriums.
- AP 5: Detaillierte Dokumentation der Verifizierungs- und Validierungsrechnungen für das BARIK-Stoffmodell unter Verwendung von FLAC3D und OGS.
- AP 5: Veröffentlichung der Ergebnisse des Forschungsvorhabens BARIK im Rahmen der 53. Geomechanik-Kolloquium am 15.11.2024 im Freiberg
- Austausch mit der BGR im Rahmen eines Treffens in Freiberg

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine im Berichtszeitraum

---

<sup>3</sup> Dai, Z.-H.; You, T.; Xu, X.; Zhu, Q.-C. (2018): Removal of Singularities in Hoek-Brown Criterion and Its Numerical Implementation and Applications. International Journal of Geomechanics, Bd. 18 (10). DOI: [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)GM.1943-5622.0001201](https://doi.org/10.1061/(ASCE)GM.1943-5622.0001201)

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Technische Universität Bergakademie Freiberg		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11890B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.03.2021 bis 31.10.2024		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 382.918,55 EUR		<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr.-Ing. habil. Heinz Konietzky

## 1. Vorhabensziele

Das Projekt beinhaltet die Entwicklung eines nichtlinearen elasto-plastischen Stoffgesetzes für die kristalline Matrix mit zuzüglich bis zu drei Schwächeflächen. Berücksichtigt werden weiterhin Erweichungsfunktionen für den Nachbruchbereich sowie eine hydraulische Kopplung in Form einer inhomogenen Permeabilitätsentwicklung als Funktion der Schädigung inkl. einer Aktualisierung des Biot-Koeffizienten. Die Validierung des Stoffgesetzes erfolgt an diversen Laborversuchen. Die Anwendung konzentriert sich auf die Nutzung als Dilatanzkriterium für Sicherheitsuntersuchungen im Endlagerbereich.

Das Projekt wird in Kooperation mit der BGE TECHNOLOGY GmbH durchgeführt.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Projekt BARIK gliedert sich in 5 Arbeitspakete (AP).

AP 1 – Entwicklung Stoffmodell:

- Entwicklung eines nichtlinearen elasto-plastischen Stoffgesetzes auf Basis des Hoek-Brown-Kriteriums unter Berücksichtigung von bis zu drei Schwächeflächen zuzüglich Gesteinsmatrix und Strain-softening-Funktionen sowie die Kopplung des mechanischen Stoffgesetzes mit einem hydraulischen in Form inhomogenen Permeabilitätsentwicklung auf Basis der mechanischen Schädigungsentwicklung.

AP 2 – Laborversuche:

- Durchführung von rein mechanischen und HM-gekoppelten Laborversuchen zur Validierung des Stoffgesetzes (Matrix-Versuche, Kluft-Versuche, gekoppelte Versuche)

AP 3 - Implementierung und Test:

- Umsetzung und Implementierung des entwickelten Stoffgesetzes in die zwei numerischen Computercodes FLAC3D von ITASCA und OpenGeoSys.

AP 4 – Evaluierung:

- Evaluierung des Stoffgesetzes beim Einsatz als Dilatanzkriterium.

AP 5 – Dokumentation:

- Zwischenzeitliche und abschließende Dokumentation aller Entwicklungen und Arbeiten sowie Datensicherung.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Weitere Verifizierungsrechnungen des BARIK-Stoffgesetzes im Vergleich zum FLAC3D built-in COMBA-Modell bzgl. des Schwächeflächenversagens. Erweiterte und derzeit noch laufende Implementierung des Strain-Softening-Verhaltens für bis zu drei Schwächeflächen. Beginn von Verifizierungsrechnungen zum Strain-Softening im Vergleich zum COMBA-Modell. Aktuell laufendes Debugging, da Abweichungen im Softening-Verhalten auftreten. Übertragung des Stoffgesetz in FLAC3D9. Bereitstellung von aktualisierten .dll-Dateien für Anwendungstests für Projektpartner. Vorbereitung und Adaptierung des Ansatzes für die hydro-mechanische Kopplung.

Weitere Durchführung der hydro-mechanisch gekoppelten Triaxialversuche zur Bestimmung der Permeabilität und des Biot-Koeffizienten bei verschiedenen Schädigungszuständen sowie Auswertung der Versuchsdaten für die Foliationswinkel von  $90^\circ$  und  $0^\circ$ .

Detailplanung, Beginn der Herstellung von Prüfkörpern mit mehreren diskreten Schwächeflächen auf Basis von Gneisprüfkörpern. Diese wurden mittels einer Gesteinssäge in spezifischen Winkelanordnungen zueinander getrennt und beide Trennkörper durch Spezialgips miteinander verbunden, sodass diskrete Schwächeflächen mit bekannten Festigkeitseigenschaften hergestellt werden konnten. Beginn der Vorversuche.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Weitere Verifizierungen/Debugging des Strain-Softening des Schwächeflächenverhaltens und im Vergleich mit dem COMBA-Modell der Firma Itasca.
- Implementierung der hydro-mechanischen Kopplung
- Beendigung der hydro-mechanisch gekoppelten Triaxialversuche für  $0^\circ$  und  $45^\circ$  sowie abschließende Auswertung dieser
- Durchführung und Beendigung einaxialer Druckversuche an Proben mit mehreren diskreten Schwächeflächen und Winkelkombinationen zur Charakterisierung der auftretenden Bruchmechanismen

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

-

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR), Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11911A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Vorhersage der heterogenen Radionuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in granitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2021 bis 30.11.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 253.632,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Cornelius Fischer	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Übergeordnetes Ziel des Verbundprojektes ist die **Erarbeitung einer verallgemeinerungsfähigen Parametrisierung reaktiver Transportmodelle** in geklüfteten Kristallingesteinen. Diese Parametrisierung soll es erlauben, den quantitativen Einfluss der Mikrometer- und Submikrometerrauheit von Kluft- und Störungsflächen in kristallinen Wirtsgesteinen in reaktiven Transportmodellen zu berücksichtigen. Die Anwendung dafür liegt in der verbesserten Vorhersagbarkeit von Radionuklidmigration und -rückhalt in Simulationsrechnungen.

Die Verbesserung der **Zusammenarbeit zwischen deutschen und russischen universitären und außeruniversitären Forschungsinstitutionen** auf diesem Gebiet ist ein weiteres Ziel des skizzierten Vorhabens. Die **Nachwuchsförderung und der resultierende Kompetenzerhalt** sollen mit dem geplanten Forschungsprojekt gestützt werden. Die kontinuierliche inhaltliche Einbindung in internationale Vorhaben und Verbünde stellt die wissenschaftlich-technische Aktualität **auf dem Gebiet der Radio(geo)chemie und nuklearen Entsorgung** auch im nationalen Rahmen sicher. Dafür sind im Rahmen dieses Verbundprojektes gemeinsam mit der Lomonossow-Universität (Moskau) Aufenthalte junger Wissenschaftler an Institutionen in Europa und Russland mit Fokus auf deren Karriereentwicklung durch aktive Teilnahme an Tagungen und Seminaren geplant.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

**AP 1:** Mineralogisch-geochemische und oberflächenanalytische Charakterisierung der Kluft- und Störungsoberflächen

**AP 2:** Heterogene Oberflächenreaktivität: Experimentelle und numerische Untersuchungen zur Sorptionseffizienz

**AP 3:** Parametrisierung und Validierung der reaktiven Transportmodelle, basierend auf experimenteller Analyse des Transportverhaltens und der Oberflächenreaktivität

**AP 4:** Nachwuchsförderung und internationaler Austausch

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Das Verfahren zur Quantifizierung der Fließratendifferenzen und Fließratenbeschleunigungen aus Simulationsrechnungen, welches auf den bisherigen numerischen Arbeiten zur Transportheterogenität auf Klufflächen im Granit von Soultz-sous-Forêts basiert, wurde zur Verwendung in anderen Materialien weiterentwickelt. Untersucht wurden bspw. kolloidführende poröse Materialien, um die Generalisierbarkeit des Verfahrens weiter zu testen und den potentiellen Anwendungsbereich zu vergrößern.

Die Datensätze zur Oberflächenreaktivität bei Kristallauflösung (Materialanalog für Kluffüllungen) wurden weiter statistisch ausgewertet, unter Verwendung des *power spectral density*- (PSD-) Ansatzes und der Ratenpektrenanalyse. Statistische Verfahren wurden dafür getestet und angewendet, um mögliche Zusammenhänge zwischen Oberflächenreaktivität und Nano-/ Mikrotopografie zu erfassen und daraus verbesserte Parametrisierungen für reaktive Transportmodelle abzuleiten.

Die Auswertung der CT-Daten aus Olkiluoto war abgeschlossen. Daraus wurden erste Geometrien als Grundlage für Transportmodelle extrahiert. Aufgrund der Limitierung der Ortsauflösung der Datensätze wurden unterschiedlich stark vereinfachte Geometrien vorbereitet. Grundlage dafür sind Informationen aus vorhandenen Positronen-Emissions-Tomografie- (PET-)Datensätzen, die den Transport quantifizieren und eine Kopplung von diffusiven und advektiven Anteilen nahelegen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die weitergeführten statistischen Arbeiten zu Ratenkarten und PSD-Analysen der Calcit-Oberflächen sollen abgeschlossen werden, ein Manuskript dazu soll abgeschlossen werden. Simulationsrechnungen auf den Kluffgeometrien von Olkiluoto werden weiter fortgeführt und sollen mit den Durchbruchskurven von Soultz-sous-Forêts und weiteren Ergebnissen aus der Literatur (bspw. aktueller EURAD-Abschlussbericht) verglichen werden. Vergleiche der Transportmodellierungen mit den PET-Datensätzen bzgl. der hydrodynamischen Parameter sind geplant. Quantitative Unterschiede der Fließmuster in den unterschiedlich mineralisierten Klüften werden analysiert und mechanistische Schlussfolgerungen gezogen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- W Zhou, C Fischer (2024): Effects of cross-scale fracture surface roughness and its spatial resolution in crystalline host rocks on hydrodynamics, InterPore2024 (13-16 May 2024), Qingdao, China (**Vortrag**)
- C Fischer (2024): Flow field tomography identifies and quantifies pore opening and clogging in sandstones, InterPore2024 (13-16 May 2024), Qingdao, China (**Vortrag**)

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11911B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Vorhersage der heterogenen Radionuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in granitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2021 bis 31.11.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 249.905,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Thorsten Schäfer	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Übergeordnetes Ziel des Verbundprojektes ist die Erarbeitung einer verallgemeinerungsfähigen Parametrisierung reaktiver Transportmodelle in geklüfteten Kristallingesteinen. Diese Parametrisierung soll es erlauben, den quantitativen Einfluss der Mikrometer- und Submikrometerrauheit von Kluft- und Störungsflächen in kristallinen Wirtsgesteinen in reaktiven Transportmodellen zu berücksichtigen. Die Anwendung dafür liegt in der verbesserten Vorhersagbarkeit von Radionuklidmigration und -rückhalt in Simulationsrechnungen.

Die Verbesserung der Zusammenarbeit zwischen deutschen und russischen universitären und außeruniversitären Forschungsinstitutionen auf diesem Gebiet ist ein weiteres Ziel des skizzierten Vorhabens. Die Nachwuchsförderung und der resultierende Kompetenzerhalt sollen mit dem geplanten Forschungsprojekt gestützt werden. Die kontinuierliche inhaltliche Einbindung in internationale Vorhaben und Verbünde stellt die wissenschaftlich-technische Aktualität auf dem Gebiet der Radio(geo)chemie und nuklearen Entsorgung auch im nationalen Rahmen sicher. Dafür sind im Rahmen dieses Verbundprojektes gemeinsam mit der Lomonossow-Universität (Moskau) Aufenthalte junger Wissenschaftler an Institutionen in Europa und Russland mit Fokus auf deren Karriereentwicklung durch aktive Teilnahme an Tagungen und Seminaren geplant.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP 1: Mineralogisch-geochemische und oberflächenanalytische Charakterisierung der Kluft- und Störungsoberflächen
- AP 2: Heterogene Oberflächenreaktivität: Experimentelle und numerische Untersuchungen zur Sorptionseffizienz
- AP 3: Parametrisierung und Validierung der reaktiven Transportmodelle, basierend auf experimenteller Analyse des Transportverhaltens und der Oberflächenreaktivität
- AP 4: Nachwuchsförderung und internationaler Austausch

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP 1:** Um die Arbeit der Projektpartner zusammenzuführen, wurden geochemische ( $\mu$ XRF, LA-ICP-MS) und Kluffgeometrie ( $\mu$ CT/XRM) an ausgewählten Proben aus dem URL BUKOV durchgeführt. Die Proben entstammen dem Bohrkern BZXII (38.8 m), anhand dessen mittels Geo-PET (HZDR) die Transportpfade in einem komplexen visualisiert wurden. Das Geo-PET Experiment legt die Vermutung nahe, dass es sich um Kluffüllungen mit Restporosität handelt, die stärker als bisher angenommen (Selbsteilungsvermögen) zur diffusiven Transportkomponente beitragen. Basierend auf Detailscans ( $\mu$ CT/XRM) wurden die Klüfte anhand von Orientierung, Apertur sowie der mineralogischen Zusammensetzung gruppiert in (teilweise-) verheilte (I) karbonatische Hauptklüfte, teils polyphasisch, mit Apertur von  $\sim$ 2-11 mm, sowie (II) quarzische Hauptklüfte mit Apertur von  $\sim$ 2-4 mm, (III) senkrecht dazu verlaufende, jüngere Klüfte  $\sim$ 2-3 mm und (IV) Mikroklüfte von  $\sim$ 0.5-1 mm. Das Kluffnetzwerk wird von Spannungsklüften (tensile fractures) mit karbonatische Sekundärphasen begleitet. Die vorläufig Auswertung der geochemischen Zusammensetzung von  $>20$  karbonatischen Klüften (laterale Profile) zeigen, dass es sich um mind. 2 Präzipitationsevents handelt. Weitere Differenzierungen (Cluster-Analyse) werden nach einer genaueren statistischen Analyse erwartet.
- AP 2:** Die Optimierung der Ablationsparameter auf Dünnschliffen wurde vorangetrieben.
- AP 4:** Der wissenschaftliche Austausch mit Universität Poitiers wurde durch einen Gastaufenthalt von Dr. Paul Sardini an der FSU Jena intensiviert. Hierzu wurden Proben aus dem Lausitzer Granodiorit ausgetauscht und für die  $^{14}\text{C}$ -PMMA Imprägnation und Autoradiographie bereitgestellt und Diffusionsexperimente begonnen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP 1:** Die beobachteten Polyphasen aus Bohrkern BZXII (38.8 m, Bukov) sollen mittels RAMAN Spektroskopie genauer bestimmt werden.
- AP 2:** Die bisherigen Sorptionsversuche sollen durch Batch-type sowie orts aufgelöste Sorptionsversuche an Proben aus dem Lausitzer Granodiorit Massif (pH 5-11) ergänzt werden.
- AP3:** Es wird durch beide Projektpartner angestrebt, die Detailsaufnahmen ( $\mu$ CT, LA-ICP-MS) und Bohrkernskaligen Untersuchungen (Geo-PET) aus Bohrkern BZXII (38.8 m, Bukov) zu einem disreten Kluffnetzwerk Modell (DFNM) zusammenzuführen.
- AP 4:** Zur Finalisierung der Experimente bezüglich der Visualisierung des verbundenen Microporenraums und der Dateninterpretation wurde ein Forschungsaufenthalt der Doktorandin Annemie Kusturica für September 2024 in Poitiers (Dr. Paul Sardini, POSINAM Laboratoire) vereinbart.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Kusturica, A. and Schäfer, T. (2023) How do alteration and structural heterogeneities influence diffusivity within granodiorites?, 18<sup>th</sup> International Conference on Chemistry and Migration Behaviour of Actinides and Fission Products in the Geosphere Migration 2023, Nantes, p. 385.

Kusturica A, Pirrung M, Hupfer S, Fischer C, Schäfer T (to be submitted): Pore space increase in response to different alteration stages of granitoid rocks based on combined  $\mu$ CT/XRM and geochemical/mineralogical analysis. *Int. J. Rock Mech. Min. Sci.*

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Forschungszentrum Jülich GmbH, Institut für Energie- und Klimaforschung (IEK) – Nukleare Entsorgung und Reaktorsicherheit (IEK-6)		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11921A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEParation von AMeridium aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.1 Sicherheits- und Endlagerkonzepte B3 Behandlungs- und Entsorgungsmethoden		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2021 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 254.678,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Giuseppe Modolo	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Gesamtziel des beantragten Projektes „Untersuchungen zur SEParation von AMeridium aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM)“ ist die wissenschaftliche Untersuchung und Weiterentwicklung von Extraktionsprozessen sowie der grundlegenden Chemie zur Abtrennung von Americium aus hochradioaktiven Abfällen. Ein weiterer wesentlicher Aspekt des Projektes ist die Ausbildung und Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses im Bereich der Nuklearen Sicherheitsforschung und Nuklearchemie im Allgemeinen und in Themen der Actinidenchemie im Besonderen. Durch eine internationale Ausrichtung des Projekts werden aktuelle Entwicklungen im Ausland berücksichtigt. Somit leistet das Projekt einen wichtigen Beitrag zum Aufbau, der Weiterentwicklung und dem Erhalt wissenschaftlich-technischer Kompetenz in der nuklearen Sicherheitsforschung.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Projekt wird in vier Arbeitspaketen bearbeitet:

- AP1: Grundlagen Koordinations- und Extraktionschemie,
- AP2: Prozessrelevante Optimierungen,
- AP3: Modellierung und Prozesstests,
- AP4: Nachwuchsförderung.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### *Arbeitspaket 1:*

BTP-(COOH)<sub>8</sub>, ein hydrophiler Komplexbildner, wurde als CHON-Alternative für SO<sub>3</sub>-Ph-BTP in Verbindung mit TODGA als Extraktionsmittel getestet. Dabei wurde eine hohe Selektivität für dreiwertige Actiniden An(III) gegenüber dreiwertigen Lanthaniden Ln(III) gefunden. Die Abtrennfaktoren weisen im Vergleich etwas niedrigere Werte als SO<sub>3</sub>-Ph-BTP auf. Dennoch ist es ein vielversprechendes Molekül, da durch die Abwesenheit von Schwefelatomen die Erzeugung von sekundären festen Abfällen im weiteren Verlauf des Abtrennprozesses vermieden wird. Die Bestimmung des pK<sub>S</sub>-Werts durch potentiometrische Titration erfolgte zunächst durch einfache basische und saure Titration, um die Deprotonierung der acht Carboxylgruppen zu erreichen. Der gleiche Prozess wurde auch mit BTBP-(COOH)<sub>8</sub> und BTPPhen-(COOH)<sub>8</sub> durchgeführt. Es war nicht möglich, alle Deprotonierungsschritte zu beobachten.

#### *Arbeitspaket 2:*

Die Stabilität von BTP-(COOH)<sub>8</sub> gegenüber HNO<sub>3</sub> wird in Hydrolyseexperimenten untersucht. Dazu wird in regelmäßigen Abständen beobachtet, wie sich die Extraktionsfähigkeit des wasserlöslichen BTP-(COOH)<sub>8</sub> im Laufe der Zeit verändert, wenn es in Salpetersäure gelöst wird. Dazu wurde der Ligand in verschiedenen Konzentrationen von HNO<sub>3</sub> gelöst und gegen TODGA in ISANE IP-Lösung als Extraktionsmittel getestet. Eine erste Extraktionsreihe als Referenz wurde gleich nach Herstellung der Lösungen durchgeführt. Die zweite Extraktion wurde eine Woche später durchgeführt. Der dritte Test wurde nach 6 Monaten durchgeführt und zeigte einen leichten Anstieg der An(III)-Verteilungsverhältnisse, der eine beginnende Degradation des Liganden bedeuten könnte. Die Ergebnisse sind aber nicht eindeutig und könnten auch durch andere Faktoren beeinflusst sein. Daher gilt der Ligand als stabil.

#### *Arbeitspaket 3:*

Um die Charakterisierung des Liganden neben den TRLFS-Messungen und kinetischen Extraktionsexperimenten fortzusetzen, wurde die Temperaturabhängigkeit untersucht. Die Extraktion wurde bei konstanter HNO<sub>3</sub>-Konzentration bei unterschiedlichen Temperaturen von 5-65°C durchgeführt. Dabei nahmen die Verteilungsverhältnisse mit zunehmender Temperatur ab, was auf eine exotherme Extraktionsreaktion hindeutet.

#### *Arbeitspaket 4:*

Die Doktorandin besuchte die FENABIUM II Spring School - The Chemistry of f-Elements 2024 in Leipzig, wo verschiedene Aspekte der Koordinationschemie der 4f- und 5f-Elemente auf ihre Relevanz für Gesellschaft und Umwelt diskutiert wurden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Bestätigung der pK<sub>S</sub>-Werte durch spektroskopische Untersuchungen und potentiometrische Titration mit konstanter Ionenstärke. Bewertung der Selektivität des Liganden gegenüber allen Spaltprodukten. Züchtung von Einkristallen und kristallographische Studien dazu.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

1. Wilden, A.; Diaz Gomez, L.J.; Sauerwein, F.S.; Modolo, G.; Geist A. Actinide separation processes in Europe and abroad – overview of current developments. FENABIUM II Spring School - The Chemistry of f-Elements, Leipzig, Germany, 27 February – 01 March 2024
2. Diaz Gomez, L.J.; Wilden, A.; Modolo, G. Charakterisierung und Stabilität des wasserlöslichen Liganden BTP-(COOH)<sub>8</sub> für die Separation von dreiwertigen An und Ln. IEK-6 Institutsseminar, Jülich, Germany, 12 June 2024

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe)		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11921B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Untersuchungen zur SEParation von AMeridium aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM) Teilprojekt B: Thermodynamische Daten und Spektroskopische Untersuchungen		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.1 Sicherheits- und Endlagerkonzepte B3 Behandlungs- und Entsorgungsmethoden		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2021 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 250.000,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Andreas Geist	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Gesamtziel des beantragten Projektes „Untersuchungen zur SEParation von AMeridium aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM)“ ist die wissenschaftliche Untersuchung und Weiterentwicklung von Extraktionsprozessen sowie der grundlegenden Chemie zur Abtrennung von Americium aus hochradioaktiven Abfällen. Ein weiterer wesentlicher Aspekt des Projektes ist die Ausbildung und Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses im Bereich der Nuklearen Sicherheitsforschung und Nuklearchemie im Allgemeinen und in Themen der Actinidenchemie im Besonderen. Durch eine internationale Ausrichtung Projekts werden aktuelle Entwicklungen im Ausland berücksichtigt. Somit leistet das Projekt einen wichtigen Beitrag zum Aufbau, der Weiterentwicklung und dem Erhalt wissenschaftlich-technischer Kompetenz in der nuklearen Sicherheitsforschung.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

### *Arbeitspaket 1:*

Grundlagen Koordinations- und Extraktionschemie

### *Arbeitspaket 2:*

Prozessrelevante Optimierungen

### *Arbeitspaket 3:*

Modellierung und Prozesstests

### *Arbeitspaket 4:*

Nachwuchsförderung

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Komplexierung von An(III) und Ln(III) mit dem N-Donor-Liganden <sup>t</sup>Bu-C4-BPP (siehe Abbildung) wurde untersucht, um den Einfluss der Anzahl und Position der Stickstoffatome im aromatischen Fünfring auf die Komplexierung zu bestimmen.

Im Anschluss an bisher durchgeführte TRLFS-Untersuchungen mit <sup>t</sup>Bu-C4-BPP wurden NMR-Experimente durchgeführt. Dabei wurden zunächst Y(III), La(III), Sm(III) und Lu(III) in Titrationsreihen untersucht. Alle Metallionen bilden bei sukzessiver Erhöhung der Ligandenkonzentration zunächst einen 1:1-Komplex, gefolgt von einem 1:2- bzw. 1:3-Komplex. Die erhaltenen 1:3-Komplexe wurden anhand von 1D- und 2D-Methoden charakterisiert. Mit Ausnahme von La(III) ist zur Bildung des 1:3-Komplexes ein Verhältnis von Metall zu Ligand von 3,0–3,5 erforderlich. Die Bildung des entsprechenden La(III)-Komplexes ist hingegen erst ab einem Verhältnis von ca. 5 abgeschlossen. Auch wurde ebenfalls ausschließlich bei La(III) ein Ligandenaustausch anhand von Signalverbreiterungen beobachtet. Dies führt dazu, dass die <sup>1</sup>H-<sup>15</sup>N-HMQC-Messung keine Kopplungen zwischen den Protonen und den enthaltenen Stickstoffatomen detektierte. Für die übrigen Metallionen konnten jedoch Kopplungen aufgenommen werden, die in guter Übereinstimmung mit der Literatur stehen.

Nach Abschluss der Arbeiten an den Lanthaniden als Referenz wurden die entsprechenden Am(III)-BPP-Komplexe hergestellt und mit NMR untersucht. Auch hier konnten die 1:1-, 1:2- und 1:3-Komplexe beobachtet werden. Es zeigte sich, dass die koordinierenden Stickstoffatome in den Am(III)-Komplexen im Vergleich zu den Ln(III)-Komplexen um rund 270 ppm hochfeldverschoben sind. Ähnliche Effekte konnten bereits bei anderen N-Donor-Liganden beobachtet werden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

#### *Arbeitspaket 1:*

Die Untersuchung von PTTO (vgl. vorangehende Zwischenberichte) wird mittels NMR vervollständigt. Quantenchemische Rechnungen zu den Unterschieden zwischen PTTO und PTEH werden durchgeführt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

J. Stracke, P. Weßling, T. Sittel, C. Adam, F. Rominger, A. Geist, P. J. Panak, *Inorg. Chem.* 2024, DOI: 10.1021/acs.inorgchem.4c00396.

J. Stracke, P. Weßling, T. Sittel, P. Meiners, A. Geist, P. J. Panak, *RSC Advances* 2024 (*submitted*).

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11931</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Einfluss der thermischen Reife auf die gekoppelten hydro-mechanischen Eigenschaften niedrig-durchlässiger Tonsteine – Feld & Laborskala (Maturity)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C1.1 Geowissenschaftliche und geotechnische Methoden zur Standorterkundung (Feld und Labor) C1.2 Charakterisierung des Geosystems und Geosynthese		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2021 bis 31.05.2026	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.299.689,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Florian Amann	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Projekts ist die Untersuchung der Abhängigkeit der petrophysikalischen und gesteinsmechanischen Eigenschaften von Tonsteinen von ihrer geologischen Versenkungsgeschichte, d. h. von der maximalen Versenkungstiefe, und den damit verbundenen, erheblichen Änderungen der maximal erreichten Drücke und Temperaturen. Dies ist erforderlich, um die Integrität potenzieller Tonsteinformationen im tiefen Untergrund und ihre Entwicklung über einen Zeitraum von 1 Million Jahren zu beurteilen. Gut geeignet für dieses Projekt sind die Tonsteine des Pliensbachiums (Unterjura), die in 8 Forschungsbohrungen entlang der Hilsmulde (ca. 50 km südlich von Hannover) in-situ vermessen und an Bohrkernen beprobt werden sollen. Das Gebiet zeichnet sich durch eine relativ homogene Faziesverteilung mit stark variierender Absenkungs- und Temperaturgeschichte aus, was das Gebiet zu einem natürlichen Labor zur Untersuchung der Tonstein-Eigenschaften macht. Ein multidisziplinärer Ansatz aus Bohrlochgeophysik und geochemischen, petrophysikalischen und gesteinsmechanischen Laborexperimenten wird eingesetzt, um die entsprechenden Parameter und Prozesse zu untersuchen.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1: Planung und Ausführung der Bohrungen und Bohrlochausbauten  
 AP2: Planung und Ausführung von hydraulischen in-situ Tests im ausgebauten Bohrloch  
 AP3: Stratigraphie  
 AP4: Laborversuche an Bohrkernen  
 AP5: Synthese

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Bohr- und Loggingarbeiten sowie die grundlegenden Laborarbeiten zur geochemischen und mineralogischen Charakterisierung der Bohrkerne wurden für alle fünf Bohrungen abgeschlossen. Die Dublettenbohrungen an den Lokationen BO1, BO3 und BO5 wurden im Anschluss an die Loggingarbeiten mit Standrohr-Doppelpacker-Systemen (SPDPS) versehen. Darüber hinaus wurden an der BGR, Hannover, die grundlegenden Arbeiten zur Stratigraphie beendet. Über die gewonnenen Basisdaten hinaus soll aber noch eine weitergehende Feinaufnahme erfolgen. Die Ergebnisse zeigen, dass der Zielhorizont, das Pliensbachium, an allen Lokationen erfolgreich in der gewünschten thermischen Reife angetroffen wurde. Somit wurden die Arbeitspakete 1 und 3 erfolgreich abgeschlossen. Zusätzlich wurden für alle Lokationen Untersuchungen zur Kationenaustauschkapazität durchgeführt.

Die Charakterisierung des Porenraums mittels Helium-Pyknometrie und Stickstoffadsorption wurde bereits vollständig für alle Bohrlokationen abgeschlossen. Permeabilität in Abhängigkeit des effektiven Stresses (5 -> 10 -> 20 -> 10 -> 5 MPa) wurde für die Proben BO3 (parallel geschichtet), BO2 (senkrecht geschichtet) und teilweise für BO1 (senkrecht geschichtet) im stationären Modus gemessen. Gasdurchbruchexperimente wurden für BO1 (parallel geschichtet) und BO2 (senkrecht geschichtet) mit Wasserstoff und in Abhängigkeit vom effektiven Stress (20, 10, 5 MPa) durchgeführt. Gasaufnahmemessungen bei „zero effective stress“ wurden für Proben aus allen Standorten bei mittleren Porendrücken < 1 MPa mit Helium durchgeführt und bezüglich der Permeabilität ausgewertet.

Messungen der einaxialen Druckfestigkeit wurden an Probematerial aller Bohrungen schichtungsparallel durchgeführt. Dabei wurden die Tests an Prüfkörpern durchgeführt, welche bei unterschiedlichen Saugspannungen equilibriert wurden, um Korrelationen zwischen Wassergehalt und Festigkeit aufzustellen. Die Ergebnisse zeigen zunehmende Festigkeitewerte mit Abnehmender Sättigung, und eine generelle Tendenz zu höheren Festigkeiten mit zunehmender maximaler Versenkungstiefe. Einige triaxial-undrainierte Tests wurden an Probematerial aller Bohrungen durchgeführt, welche ähnliche Zusammenhänge bezüglich Festigkeit zeigen. Das generelle poromechanische Verhalten unter undrainierte Belastung, d.h. der spröde Versagensmechanismus, der im Nachbruchbereich durch eine deutliche Festigkeitsreduktion und Dilatation charakterisiert ist, unterscheidet sich jedoch wenig zwischen den unterschiedlichen Lokationen.

Eine erste Analyse der Loggingdaten erfolgte hinsichtlich der durchteuften lithostratigraphischen Bohrlochsequenzen. Akustische Televue Logs wurden hinsichtlich der räumlichen Klüftverteilungen und Klüftgeometrien analysiert. Eine erste Versuchsreihe hydraulischer Bohrlochversuche wurde mittels der SPDP-Systeme an den Lokationen BO1, BO3 und BO5 durchgeführt. Die Detailauswertung der Ergebnisse steht noch aus.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

In den folgenden Monaten werden die petrophysikalischen und geomechanischen Messungen an allen Bohrkernen fortgeführt. Weitere hydraulische Bohrlochversuche zur Ermittlung der in-situ Permeabilität sind für den Sommer 2024 geplant.

Mit der Vervollständigung der petrophysikalischen und geomechanischen Daten können zudem erste Korrelationen zwischen physikalischen Gesteinseigenschaften und thermischer Reife herausgearbeitet werden.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- Burnaz L., Littke R., Erbacher J., Strauss H., Grohmann S., Amann F. (2024). Lower Jurassic (Pliensbachian-Toarcian) marine paleoenvironment in western Europe: Sedimentology, geochemistry and organic petrology of the wells Mainzholzen and Wickensen, Hils Syncline, Lower Saxony Basin. International Journal of Earth Sciences, 1-24.

- Castro-Vera L., Amberg S., Gaus G., Leu K. and Littke R. (2024). 3D basin modeling of the Hils Syncline, Germany: reconstruction of burial and thermal history and implications for petrophysical properties of potential Mesozoic shale host rocks for nuclear waste storage. *International Journal of Earth Sciences*, 1-32.
- Burchartz, R., Jalali, M., Grohmann, S., Winhausen, L., Gaus, G., Seemann, T., Erbacher, J., Littke, R., and Amann, F.: The Influence of Burial History on the In-situ Petrophysical and Mechanical Characteristics of Pliensbachian Shale, EGU General Assembly 2024, Vienna, Austria, 14–19 Apr 2024, EGU24-16083, <https://doi.org/10.5194/egusphere-egu24-16083>, 2024.
- Castro-Vera, L., Amberg, S., Gaus, G., Leu, K., Littke, R.: 3D basin modeling of the Hills Syncline, Germany: reconstruction of burial and thermal history and implications for petrophysical properties of potential Mesozoic shale host rocks for nuclear waste storage, *Tage der Standortauswahltag 2024, Goslar*.
- Gaus, G., Seemann, T., Burchartz, R., Winhausen, L., Amann, F., and Littke, R.: Kompositionelle und petrophysikalische Charakterisierung von Tonsteinen in Abhängigkeit der thermischen Reife: Experimentelle Untersuchungen am Amaltheenton, Niedersachsen, *Tage der Standortauswahl 2024, Goslar*.
- Burchartz, R., Jalali, M., Winhausen, L., Gaus, G., Grohmann, S., Seemann, T., Erbacher, J., Littke, R., Amann, F.: Petrophysikalische und hydrogeologische in-situ Charakterisierung des Amaltheentons in Abhängigkeit der Versenkungs- und Temperaturgeschichte, *Tage der Standortauswahl 2024, Goslar*.
- Winhausen, L., Luna, I., Burchartz, R., Jalali, M., Seemann, T., Gaus, G., Littke, R., Amann, F.: Der Einfluss der Versenkungsgeschichte und Sättigung auf die geomechanischen Eigenschaften von Tonsteinen, *Tage der Standortauswahl 2024, Goslar*.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11941</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern - WiGru-9			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung C3.2 Methodische Grundlagen der Nachweisführung			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2021 bis 30.09.2024		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 2.250.056,65 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. U. Noseck	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen des Vorhabens werden die internationalen Entwicklungen zu Strategien und methodischen Vorgehensweisen bei einem Safety Case durch Mitarbeit in internationalen Arbeitsgruppen mitgestaltet und die Ergebnisse im Hinblick auf ihre Bedeutung für das deutsche Standortauswahlverfahren ausgewertet. Die Ergebnisse können zudem Ausgangspunkt weiterer nationaler Forschungsvorhaben sein bzw. in bereits laufende nationale Forschungsvorhaben einfließen.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

TA 1: Bearbeitung grundlegender Aspekte

- Verfolgung und Bewertung internationaler Entwicklungen zu offenen Fragen und zur Weiterentwicklung von Strategien und methodischen Vorgehensweisen bei einem Safety Case inklusive Kommunikation und Wissenserhalt und Einbringung nationaler Interessen in internationale Aktivitäten, insbesondere durch Mitarbeit in internationalen Arbeitsgruppen der OECD/NEA.
- Diskussion von eigenen und externen Ergebnissen in nationalen Diskussionsforen zur Erarbeitung gemeinsamer Stellungnahmen und Vorgehensweisen zu ausgewählten Themen der Endlagerung in Deutschland.
- Auswertung neuer wissenschaftlicher Ergebnisse und Aufbereitung zur Verwendung in Instrumentarien für Langzeitsicherheitsanalysen.

TA 2: Bearbeitung von Schwerpunktthemen

- Vergleich der Ansätze und Herangehensweisen verschiedener Länder zur Bewertung der Langzeitsicherheit von Endlagern und Weiterentwicklung der eigenen Ansätze. Schwerpunkte sind Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen, Benchmark-Rechnungen sowie die Erstellung State-of-the-art-Berichten für Endlager in Salzformationen.
- Modellentwicklung zur Bentonitaufsättigung und Untersuchung der Auswirkungen von Permafrost auf Strömungsvorgängen in geklüfteten Medien.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- TA 1: - Organisation und Leitung des IGSC Core Group Treffens und weiterer Treffen des Programm-Komitees für das Safety Case Symposium 2024. Teilnahme mit Vortrag an der NEA International Conference on Geological Repositories (ICGR-7) in Busan, Südkorea. Teilnahme an der Arbeitsgruppe GeneSiS mit Durchführung von Interviews mit SKB, Nagra, Posiva und Andra zu Erfahrungen bei der Entwicklung des Safety Case vom generischen zum standortspezifischen Stadium.
- Teilnahme an den Sitzungen des EGAR-Bureaus, Teilnahme mit Vorträgen am 4. IDKM Plenary Meeting und am 4. EGAR Plenary Meeting in Paris. Vorbereitung des Mandats und Arbeitsprogramms der neuen Expertengruppe zu Archiving und Awareness Preservation (EGAAP).
- Planung und Durchführung des CRC-7 Meetings in der Schweiz; Auswertung und Diskussion der Ergebnisse des Questionnaires für die CRC-Mitglieder zum Themengebiet „Software und Parameter“; Finalisierung des Status Reports; Erstellung einer Online-Literaturdatenbank zu geochemischen Bedingungen im Kristallin und Eingabe internationaler Referenzen zu diesem Themengebiet, inkl. diverser Arbeitstreffen.
- TA 2: - Fortsetzung der Analyse von komplexeren Modellsystemen verschiedener Länder im Rahmen der gemeinsamen Aktivität zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse (JOSA); Weiterarbeit an der Dokumentation Teil 2; dazu Abstimmung mit den Partnern in mehreren Video-Gesprächen.
- Dokumentation der Vergleichsrechnungen für ein Endlager im Salzgestein im internationalen Vorhaben DECOVALEX 2023, Task F; Federführende Ausarbeitung inkl. Einreichung und erforderlicher Nacharbeit einer gemeinsamen Veröffentlichung; Mitarbeit an zwei weiteren Veröffentlichungen.
- Teilnahme am Workshop der Task Force EBS im April in Prag. Vorstellung und Diskussion eines Entwurfs für die Beschreibung von Task 14a.
- Auf dem CatchNet Jahresmeeting im Juni in Whitehorse, Kanada, wurde der Stand bei den Einfrierversuchen vorgestellt, bei denen reproduzierbare Ergebnisse erzielt werden konnten, aber auch zwei noch nicht erklärbare Phänomene beobachtet wurden.
- Bei der International Conference on Permafrost (ICOP) 2024 in Whitehorse wurden die Ergebnisse der Modellierung zur Talikbildung präsentiert. Die sich darum rankenden Diskussionen und praktischen Tipps waren außerordentlich hilfreich für eine Fortsetzung dieser Arbeiten.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- TA 1: - Organisation und Leitung des kommenden IGSC Core Group Treffens und der abschließenden Treffen des Programmkomitees für das SC Symposium 2024 sowie Review der eingereichten Beiträge. Leitung und Durchführung des SC Symposium 2024 mit Vorträgen und Panel-Sitzungen in Budapest. Leitung der 26. IGSC-Sitzung (online). Weiterarbeit in der neuen Arbeitsgruppe GeneSiS der IGSC, Auswertung der bisherigen Interviews und Planung weiterer Interviews mit Organisationen aus Ländern, die in einem frühen Stadium des Endlagerprogramms sind.
- Teilnahme Kick-Off Meeting und Bureau Meetings der neuen Expertengruppe EGAAP. Fertigstellung des Abschlussberichts zum Set of Essential Records (SER).
- Überarbeitung des CRC-Questionnaires und Zusammenfassung; Veröffentlichung des Status Reports; Zusammenfassung der Ergebnisse aus der Online-Literaturdatenbank zu geochemischen Bedingungen und Diskussion zukünftiger Arbeiten
- Fertigstellung des Berichtes „Development of scenarios for repositories for radioactive waste in salt formations“ für den Salt Club.

- TA 2:
- Weiterführung der Analyse von Modellsystemen verschiedener Länder im Rahmen der gemeinsamen Aktivität zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse (JOSA). Fertigstellung der Dokumentation Teil 2, Planung der dritten Phase.
  - Teilnahme am internationalen Vorhaben DECOVALEX 2027 mit Modellrechnungen für Salz und Kristallingestein; Planung der Rechenfälle.
  - Optimierung der Versuchsführung bei den Einfrierversuchen. Vorbereitung eines diesbezüglichen CatchNet Seminarvortrags.
  - Fertigstellung der Beschreibung von Task 14a der Task Force on EBS zur Verteilung an die TF-Mitglieder und Teilnahme am nächsten Meeting im September in Hannover.
  - Erstellung eines Berichtsteils über die Modellrechnungen zur Talikbildung für den Abschlussbericht.

## **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Kröhn, K.-P.: Groundwater flow under permafrost conditions and talik formation. 12th International Conference on Permafrost (ICOP), Whitehorse, Kanada, Juni 2024.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragsnehmer:</b> Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11971A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschmelzen für Verschlussmaßnahmen von Endlagern für radioaktive Abfälle im Wirtsgestein Salz (SalVE), Teilprojekt A	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.2 Endlagertechnik C2.3 Geotechnische und technische Barrieren	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2021 bis 31.01.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 31.01.2024
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 444.921,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Daniela Freyer

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Hauptziel des Vorhabens besteht darin, die Möglichkeit einer Anwendung von Salzschmelzensystemen (SSS) für Verschlusskomponenten in einem Endlager in Steinsalz zu prüfen und ggf. konkrete Konzepte dafür herzuleiten. Der Einsatz ist in Bezug auf die Betriebsphase, eine eventuelle Rückholung, und den langzeitlichen, sicheren Einschluss zu prüfen, aber auch übergreifend zu betrachten. Als Teilziele folgen daraus: Anforderungen an die SSS sind zu formulieren und bekannte Vertreter hinsichtlich ihrer Eignung zu bewerten. Mit Hilfe von Versuchen im Liter-Maßstab sind Verarbeitungs-, Erstarrungs- und Reaktionsverhalten zu untersuchen sowie ein Einbringkonzept für den untertägigen Einsatz zu entwickeln. Abschließend sind Planungshinweise für eventuelle weitergehende Demonstrationsversuche zu formulieren.

Bei dem Vorhaben handelt es sich um Verbundprojekt zwischen TUBAF (mit dem IfG Leipzig als Unterauftragnehmer) und BGE TECHNOLOGY GmbH (FK 02E11971B).

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Erarbeiten der Anforderungen und Randbedingungen

AP2: Datenzusammenstellung, Literatursichtung relevanter Salzschmelzensysteme

AP3: Präzisierung der geologisch/technologischen und thermischen Randbedingungen für die vorausgewählten Endlagerkonzepte im Steinsalz

AP4: Auswahl in Frage kommender Salzschmelzen für die identifizierten Randbedingungen

AP5: Überprüfung der Einsatzfähigkeit von Salzschmelzen unter den Bedingungen eines Endlagerbergwerkes

AP6: Handhabungsversuche an positiv befundenen Salzschmelzen

AP7: Ableitung von Empfehlungen zur Anwendbarkeit ausgewählter Salzschmelzen in einem HAW Endlagerbergwerk und zur Durchführung weiterer Forschungsarbeiten

AP8: Dokumentation und Berichterstattung

Die Arbeitspakete 1, 3, 4, 5, 7 und 8 werden gemeinschaftlich bearbeitet, AP2 und AP6 ohne Beteiligung des Verbundpartners.

### **3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse**

Erstellung des Abschlussberichtes (AP8) unter Zusammenführung der Erkenntnisse aus den einzelnen Untersuchungen und theoretischen Betrachtungen sowie die Gegenüberstellung zu den ursprünglichen abgeleiteten Anforderungen. Darstellung des Potentials von Salzschnmelzen mit Zusammenfassung von Vor- und Nachteilen sowie Empfehlungen für potentielle Anschlussuntersuchungen.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Fertigstellung des Abschlussberichtes (einschließlich Anhangsbericht (Detailbericht) zu AP2) mit finaler Endabstimmung aller Projektpartner und Übergabe an den Projektträger.

### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Vortrag zum Projektabschluss mit Überblick zum Ergebnis der Machbarkeitsstudie auf dem US/German Workshop on Salt Repository Research, Design, & Operations. 24.-27.06.2024, Manchester: F. Häusler, D. Freyer, A. Keller, T. Popp, Till (2024): Feasibility study on the applicability of low-temperature molten salts for closure measures of repositories for radioactive waste in the host rock salt (SalVE project).

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> BGE TECHNOLOGY GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11971B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschmelzen für Verschlussmaßnahmen von Endlagern für radioaktive Abfälle im Wirtsgestein Salz (SalVE), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.2 Endlagertechnik C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2021 bis 31.01.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 31.01.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 119.416,50 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Andreas Keller	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Hauptziel des Vorhabens besteht darin, die Möglichkeit einer Anwendung von Salzschmelzensystemen (SSS) für Verschlusskomponenten in einem Endlager in Steinsalz zu prüfen und ggf. konkrete Konzepte dafür herzuleiten. Der Einsatz ist in Bezug auf die Betriebsphase, eine eventuelle Rückholung, und den langzeitlichen, sicheren Einschluss zu prüfen, aber auch übergreifend zu betrachten. Als Teilziele folgen daraus: Anforderungen an die SSS sind zu formulieren und bekannte Vertreter hinsichtlich ihrer Eignung zu bewerten. Mit Hilfe von Versuchen im Liter-Maßstab sind Verarbeitungs-, Erstarrungs- und Reaktionsverhalten zu untersuchen sowie ein Einbringkonzept für den untertägigen Einsatz zu entwickeln. Abschließend sind Planungshinweise für eventuelle weitergehende Demonstrationsversuche zu formulieren.

Bei dem Vorhaben handelt es sich um ein Verbundprojekt zwischen der BGE TECHNOLOGY GmbH und der TU Bergakademie Freiberg (mit dem Institut für Gebirgsmechanik in Leipzig als Unterauftragnehmer) (02E11971A)

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP1: Erarbeiten der Anforderungen und Randbedingungen.
- AP3: Präzisierung der geologisch/technologischen und thermischen Randbedingungen für die vorausgewählten Endlagerkonzepte im Steinsalz
- AP4: Auswahl in Frage kommender Salzschmelzen für die identifizierten Randbedingungen
- AP5: Überprüfung der Einsatzfähigkeit von Salzschmelzen unter den Bedingungen eines Endlagerbergwerkes
- AP7: Ableitung von Empfehlungen zur Anwendbarkeit ausgewählter Salzschmelzen in einem HAW Endlagerbergwerk und zur Durchführung weiterer Forschungsarbeiten
- AP8: Dokumentation und Berichterstattung

Die Arbeitspakete 1, 3, 4, 5, 7 und 8 werden gemeinschaftlich bearbeitet, AP2 und AP6 nur auf der Seite des Verbundpartners.

### **3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse**

Im Berichtszeitraum erfolgte kein Projektgespräch.

AP7: Es erfolgte die Zusammenführung der Erkenntnisse aus den einzelnen Untersuchungen und theoretischen Überlegungen sowie die Gegenüberstellung zu den ursprünglich formulierten Anforderungen. Abschließend wurden Empfehlungen zur Eignung und zu weitergehender Forschung abgeleitet.

AP8: Mitwirkung bei der Berichterstellung des gemeinsamen Abschlussberichtes (Teilprojekt A+ B)

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Keine

### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Konferenzbeitrag: Häusler, Felix; Freyer, Daniela; Keller, Andreas; Popp, Till (2024): Feasibility study on the applicability of low-temperature molten salts for closure measures of repositories for radioactive waste in the host rock salt (SalVE project). US/German Workshop on Salt Repository Research, Design, & Operations. 24.-27.06.2024, Manchester.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11981A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C2.4 Monitoring		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2021 bis 31.07.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 813.471,50 EUR	<b>Projektleiter:</b> PD Dr. habil. Andrés G. Muñoz	

## 1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Dieses Vorhaben verfolgt eine grundlegende Beschreibung der möglichen Korrosionsvorgänge in der technischen Barriere, die in den Wirtgesteinen Ton und Granit aufgrund der Wechselwirkung des Behältermaterials mit dem Verfüll-Stoff Bentonit auftreten können.

Dazu wird eine umfassende Korrosionsstudie erstellt, die innovative Laboruntersuchungen mit Blick auf die Vorbereitung von Feldexperimenten in einem Bohrloch am Grimsel-Felslabor beinhaltet. Ein möglichst umfassendes Verständnis der metallischen Korrosion von diversen degradationsbeständigen und für den Endlagerbehälter infrage kommenden Materialien soll entwickelt werden. Dabei werden möglichst realitätsnahe Temperatur-, Druck- und chemische Bedingungen berücksichtigt, wie sie im Nahfeld eines Endlagers für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle im Tongestein zu erwarten sind. Zu den Feldkorrosionsstudien gehört die Entwicklung eines Monitoringsystems.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Im Einzelnen werden folgende Teilziele verfolgt

- AP 1 Entwicklung der elektrochemischen Sensorik zur Anwendung in In-Situ-Experimenten.
- AP 1.1 Elektrochemische Untersuchungen der Korrosion an der Metall-Porenwasser Grenzfläche.
- AP 1.2 Monitoring der Grenzflächenparameter in Langzeit-Laborexperimenten

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### **Elektrochemische Untersuchungen (AP 1.1)**

##### *Korrosion unter Gamma-Strahlung*

Die von KIT gelieferten spektroskopischen (EDX und XPS) und Mikroskopie-Ergebnisse (REM) der in Kooperation mit UJV-Rez durchgeführten Korrosionsexperimente von Gusseisen GGG40 in gesättigtem Bentonite unter Gamma-Strahlung wurden ausgewertet und analysiert. Einige Ergebnisse sind in den Meilensteinen des internationalen Projektes ConCorD (EURAD) miteingeflossen. Bentonit-Proben aus diesem Experiment wurden mittels XRD und DTA (Thermogravimetrie) von den Partner BGR analysiert. Außerdem sind metallographische Studien der gestrahlten Proben von dem Partner IW-LUH durchgeführt worden. Im Allgemeinen konnte man eine Erhöhung der Korrosionsgeschwindigkeit (5-fach) unter einer  $\gamma$ -Strahlungsdosisleistung von  $130 \text{ Gy h}^{-1}$ . Dies führte zu einem übermäßigen Zufluss von Fe(II)-Ionen in die Bentonitsuspension und deren Einbau in die Smektitstruktur. Außerdem wird der Korrosionsprozess ein Ringmuster hinterlassen, die eher zu gekoppelten Diffusion-Fällungs-Prozessen verbunden ist.

#### **Monitoring der Grenzflächenparameter in Langzeit-Laborexperimenten (AP 1.2)**

Die erste Reihe der Langzeitkorrosionsexperimente der Kupferlegierung CuNi30Mn1Fe bei  $30^\circ\text{C}$  mit der neu aufgebauten Bentonit-Zelle wurde abgeschlossen. Die Metallproben befinden sich jetzt im KIT-Mikroskopie-Labor für die morphologische und spektroskopische Oberflächencharakterisierung. Während des Experimentes wurden Niederstrom-Polarisationen und elektrochemische Impedanz bei Korrosionspotential in regelmäßigen Abständen durchgeführt. Damit werden das Zeitverhalten der Korrosionsgeschwindigkeit und des Korrosionspotentials beobachtet. Impedanzspektren spiegeln chemische Änderungen der Grenzfläche Metall-Bentonit wider.

Zyklovoltammetrie an einer 2 mm Durchmesser Iridium-Elektrode, die zentrisch 1 mm über die Probe positioniert wird wurde in regelmäßigen Abständen durchgeführt. Das in-situ Wachstum des Oberflächenoxides erlaubt die Bestimmung des pH-Wertes und daher eignet sich hervorragend als robuster pH-Sensor.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Untersuchung der metallographischen Struktur von Containermaterialien als Grund für die heterogene Korrosion mittels des elektrochemischen Rastermikroskops in Zusammenarbeit mit dem Partner IW-LUH; Ergänzung der in der GRS durchgeführten elektrochemischen Rasterexperimente mit EBSD Mikroskopie (AP 1.1).
- Zusammenstellung, Auswertung und Interpretation aller Ergebnisse: Schreiben von Fachartikeln

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- A.G. Muñoz, D. Schild, D. Dobrev, S. Kaufhold, V. Viebranz, Corrosion of spheroidal graphite cast iron in saturated Wyoming bentonite under high g-radiation dose rate: a model experiment emphasizing surface chemistry. Oral presentation. Closing Project Meeting ConCorD, EURAD, 27<sup>th</sup> May, Bern, Switzerland, 2024.
- A.G. Muñoz et al. WP15 ConCorD state-of-the-art report (container corrosion under disposal conditions). Front. Nucl. Eng. 3 (2024) 1404739. doi:10.3389/fnuen.2024.1404739

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe)		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11981B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt B.		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C2.4 Monitoring		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2021 bis 31.07.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 459.413,62 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Finck	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Die chemische und mechanische Stabilität von Metallbehältern für radioaktive Abfälle stellt einen wichtigen Aspekt im Rahmen der Langzeitsicherheitsanalyse dar. Für eine realitätsnahe Modellierung der Behälterkorrosion unter endlagerrelevanten Bedingungen ist ein detailliertes Verständnis der zugrundeliegenden Teilprozesse erforderlich. Ziel dieses Vorhabens ist, das Verständnis der Korrosion des metallischen Abfallbehälters in Bentonit-basiertem Milieu unter den T- und P-Bedingungen im Nahfeld eines Endlagers für wärmeentwickelnde Abfälle wesentlich zu verbessern. Dies wird durch die Kombination von in-situ Experimenten im Untertagelabor und Experimenten im Labor mit Metallcoupons unter definierten Bedingungen erreicht. Mit Hilfe elektrochemischer Methoden sollen Teilreaktionen der Metallkorrosion erschlossen werden und mit Hilfe spektroskopischer und mikroskopischer Methoden die Struktur und Zusammensetzung der Korrosionsprodukte sowie deren Oberflächenmorphologie charakterisiert werden. Eine Zusammenarbeit innerhalb von IMKORB erfolgt mit der GRS Braunschweig, der BGR und der Leibniz Universität Hannover.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

KIT-INE arbeitet innerhalb von IMKORB in den folgenden Arbeitspaketen:

AP 3: Laboruntersuchungen der Korrosion von Stahlcoupons in Bentonit.

AP 4: In-situ Korrosionsexperimente von Stahlcoupons in Bentonit im Untertagelabor in Grimsel.

AP 6: Dokumentation und Publikation.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

KIT-INE arbeitet innerhalb von IMKORB in den folgenden drei Arbeitspaketen.

**AP 3:** Die Korrosionsexperimente unter statischen Bedingungen in Autoklaven bei Raumtemperatur (RT) mit 9 Monaten Reaktionszeit wurden beendet. Für beide Werkstoffe (Feinkornbaustahl, Federstahl) ist die Korrosionsrate leicht geringer als diejenige, welche nach 6 Monaten bestimmt wurde. Weitere Analysen (z.B. SEM-EDX) stehen noch an.

Die Analysen der Proben aus Experimenten unter dynamischen Bedingungen bei RT und bei 50°C mit 3 Monaten Reaktionszeit wurden beendet. Es konnte kein signifikanter Unterschied zu den Ergebnissen aus Versuchen unter statischen Bedingungen nach 3 Monaten festgestellt werden. Die bestimmten Korrosionsraten sind ebenfalls sehr ähnlich.

Die Experimente unter dynamischen Bedingungen bei Raumtemperatur (RT) und bei 50°C mit 6 Monaten Reaktionszeit wurden beendet. Für das Porenwasser im Auslassreservoir nähert sich der pH-Wert mit zunehmender Reaktionszeit dem pH im Einlassreservoir an (pH im Bereich 9.4-9.8). Dies ist im Einklang mit Ergebnissen aus Versuchen mit 3 Monaten Reaktionszeit. Porenwasser wurden ultrazentrifugiert und für anschließende quantitative Analysen mittels ICP-OES und IC vorbereitet; die Messungen stehen derzeit noch aus. Die Analyse der Couponoberflächen wurde begonnen. XAS Messungen von an dem Coupon anhaftenden Bentonit wurden durchgeführt um Information über die Fe Speziation an der Coupon/Bentonit Grenzfläche zu gewinnen.

Die ersten Korrosionsexperimente bei Raumtemperatur in Gefäßen mit Schliffstopfen (um niedrigere Sauerstoffgehalte zu erreichen) wurden geöffnet und ausgewertet. Für die erste Kontaktzeit von 4 Wochen liegt für beide Werkstoffe (Feinkornbaustahl, Grauguss) die gravimetrisch bestimmte Korrosionsrate bei 12 µm/a.

**AP 4:** In AP 4 wurden im Berichtszeitraum keine experimentellen Arbeiten durchgeführt. Die eingesetzten Coupons korrodieren weiterhin in Kontakt mit Bentonit in einem speziellen Bohrloch, welches im Rahmen des internationalen MaCoTe Experiments im Untertagelabor Grimsel (CH) verwendet wird.

**AP 6:** Das Schreiben der Dissertation wurde begonnen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

**AP 3:** Die Analyse aller Proben aus Versuchen unter statischen und dynamischen Bedingungen soll abgeschlossen werden. Die Ergebnisse sollen es ermöglichen ein mechanistisches Modell dieser Prozesse zu entwickeln.

Replikate der Experimente mit längeren Kontaktzeiten in Gefäßen mit Schliffstopfen sollen geöffnet und ausgewertet werden. Die bereits vorhandenen Coupons und Porenwasser sollen analysiert werden. Ein Parallelversuch, in dem die in situ pH Entwicklung gemessen wird, soll neu angesetzt werden.

**AP 4:** Fortsetzung der wissenschaftlich/technischen Koordinierung hinsichtlich der Arbeiten von KIT-INE im Rahmen des MaCoTe Experiments im Untertagelabor Grimsel (CH).

**AP 6:** Priorität liegt auf dem Schreiben der Dissertation.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Es gibt von KIT-INE aktuell keine Berichte oder Veröffentlichungen zu diesem Projekt.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Leibniz Universität Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11981C</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonitbasierten Endlager-Konzepten (IMKORB), Teilprojekt C			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C2.4 Monitoring			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2021 bis 31.07.2025		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 588.972,74 EUR		<b>Projektleiter:</b> Herr Dr.-Ing. Thomas Hassel	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Hauptziel des Verbundvorhabens IMKorB mit der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Fachbereich Endlagersicherheitsforschung, am Standort Braunschweig, der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR) und dem Institut für Nukleare Entsorgung am Karlsruher Institut für Technologie (KIT-INE) ist das Design und die Implementierung eines Monitoringsystems zur Bewertung der Korrosionsverläufe von potentiellen Werkstoffen für Endlagerbehälter in Langzeit-In-situ-Experimenten durch Fernbestimmung von lokalen physikalisch-chemischen Parametern. Die Arbeiten werden strategisch in die Entwicklung einer sogenannten „Korrosionskarte“ und in die Entwicklung und Erprobung einer Messsonde unterteilt.

Mittels der Korrosionskarte sollen Zusammenhänge zwischen der Art der Korrosion und den mittels Sensoren messbaren Indikatoren dargestellt werden. Hierzu ist ein möglichst umfassendes Verständnis der Korrosion von Metallen unter endlagernahen Randbedingungen in Ton- oder Kristallingestein erforderlich.

Neben dem Design der eigentlichen Messsonde gehört auch die Entwicklung von ausreichend miniaturisierter Sensorik zu den Aufgaben des Vorhabens. Die Sensoren dienen hierbei der Erfassung der verschiedenen korrosionsempfindlichen Parameter. Es werden hierfür Impedanz- und Polarisationsmethoden angewendet, wodurch neben der Ermittlung der Korrosionsgeschwindigkeit auch Diffusionsprozesse und Passivierungen erfasst werden können.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP1: Entwicklung der elektrochemischen Sensorik zur Anwendung in In-Situ-Experimenten
- AP2: Laboruntersuchungen zum Einfluss des Materialzustandes (Herstellungsprozess und Zusammensetzung) auf den Korrosionsangriff der Metallcoupons
- AP3: Laboruntersuchungen der Korrosion von Stahlcoupons in Bentonit
- AP4: In-Situ Korrosionsuntersuchungen von Stahl in Bentonit am Untertagelabor in Grimsel
- AP5: Design und Konstruktion einer optimierten In-Situ-Methodik zum Monitoring und zu Langzeitkorrosionsexperimenten
- AP6: Koordination und Dokumentation

### **3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse**

Mit den im zweiten Halbjahr 2023 definierten Randbedingungen des Modellelektrolyten für die Korrosionsuntersuchungen wurde dieser in Diskussion mit den Projektpartnern final festgelegt. Eine hohe Carbonatkonzentration bei einem pH-Wert von 8,6 wurde durch die Verwendung eines Puffersystems aus  $\text{KHCO}_3$  und  $\text{K}_2\text{CO}_3$  erreicht. Die Salinität und Chloridkonzentration wurde durch die Verwendung von KCl eingestellt. Dieser so hergestellte Modellelektrolyt bildet somit zum einen die Zusammensetzung der in Endlagern auftretenden Kristallwassern der Wirtsgesteine ab, zum anderen wurden die Konzentrationen so gewählt das eine erhöhte Korrosionsrate vorliegt. Unter Verwendung einer Mikromesszelle wurden die Korrosionseigenschaften im Rahmen von Messungen des offenen Korrosionspotentials und Bestimmung der Stromdichte-Potential-Kurven gemessen. Die Messungen der ausgewählten Behältermaterialien 56Si7 (1.5026), 15MnNi6-3 (1.6210), GJS 400-15 (5.3106), GJS 350 (5.3101), X12CrNi23-13 (1.14833), Zr702 (R60702) und CuNi30Mn1Fe (2.0882) erfolgte unter Berücksichtigung des Probenkoordinatensystemes. Der Radius des Elektrolyttropfens auf der Probenoberfläche ist variabel und wurde so gewählt, dass mehrere Körner benetzt werden. Dies gewährleistet einerseits die Messung des Einflusses der Korngrößen und Korngrenzen auf das Korrosionspotential, andererseits werden auch die jeweiligen herstellungsbedingten Kristallorientierungen und Kristallflächen der gemessenen Raumrichtung berücksichtigt. Ein Einfluss des Modellelektrolyten auf die Korrosionsraten soll durch ergänzende Referenzmessung mit einem 2M NaCl Elektrolyten erfolgen. Eine Abschließende Bewertung der Wechselwirkungen erfolgt im zweiten Halbjahr 2024.

Die Abnahme der bestellten EBSD-Einheit für das Großkammer-Rasterelektronenmikroskop erfolgte Mitte Juni 2024, sodass der Beschaffungsprozess im Berichtszeitraum abgeschlossen wurde. Um die chemischen mit den kristallographischen Eigenschaften verknüpfen zu können, wurden mit Rücksprache des Projektpartners GRS Probenbereiche auf den Coupons definiert. Damit die Daten orts aufgelöst analysiert werden können, werden ROIs auf den Proben dauerhaft markiert. Dies erfolgt z.B. durch ein Raster aus Mikrohärteeindrücken die ein Koordinatensystem aufspannen. Durch festlegen dieser Referenzpunkte können die Daten ortsbezogen betrachtet werden, auch wenn ein Wechsel zwischen Analysegeräten notwendig ist. Gleichzeitig kann auf Basis der Rohdaten eine Berechnung der mikrostrukturellen und kristallographischen Eigenschaften entsprechend den Anforderungen des Projektpartners GRS erfolgen. Die Messkampagne wurde abgesprochen und beinhaltet eine Kombination und Ergänzung der beiden Projektpartner GRS und IW/UWTH.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Im zweiten Halbjahr 2024 wird die Messkampagne der EBSD Analysen durchgeführt. Das Probenmaterial wird durch die GRS bereitgestellt und bereits für die folgenden elektrochemischen Analysen vorbereitet. Da für die EBSD-Messungen eine bis zu  $0,06 \mu\text{m}$  polierte und oxidschichtfreie Oberfläche notwendig ist erfolgt die Probenpräparation am IW/UWTH. Um die Ortsauflösung zu gewährleisten wird für jede Probe das Referenzkoordinatensystem (ROIs) und die Orientierungen dokumentiert. Im Anschluss der EBSD Messungen werden diese mit dem Probenmaterial der GRS übergeben. Dieses Vorgehen ermöglicht die elektrochemischen mit den kristallographischen Eigenschaften gemeinsam zu betrachten. Der Zeitplan der Untersuchungen erstreckt sich über die beiden kommenden Berichtszeiträume.

Um die Korrosionsversuche und mikrostrukturelle Betrachtung abzuschließen werden alle ermittelten Eigenschaften der Behältermaterialien richtungsabhängig dargestellt und bewertet. Hierdurch wird ein material- und herstellungscharakteristisches Eigenschaftsprofil erzeugt.

### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

keine

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> TU Clausthal - Lehrstuhl für Geomechanik und multiphysikalische Systeme		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11991</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Entwicklung und Validation einer neuartigen Versuchstechnik für triaxiale Kriechversuche bei geringer deviatorischer Belastung (KRIECHTECH)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2021 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 304.468,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> apl. Prof. Dr.-Ing. habil. Uwe Düsterloh	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Entwicklung und Validation einer neuartigen Versuchstechnik für triaxiale Kriechversuche bei geringer deviatorischer Belastung durch Konstruktion, Bau und Inbetriebnahme von drei Triaxialprüfständen mit hochpräziser Axial- und Radiallastregelung für verzerrungsgeregelte Kriechversuche. Durchführung und Auswertung verzerrungsgeregelter Triaxialkriechversuche zur Quantifizierung des Kriechverhaltens von Salzgesteinen bei deviatorischen Beanspruchungen von  $\sigma_v \approx 1 \text{ MPa} - 6 \text{ MPa}$  und numerische Sensitivitätsanalysen zum Einfluss des Kriechverhaltens bei kleinen deviatorischen Spannungen auf das langfristige Trag- und Deformationsverhalten des Gebirges im Umfeld untertägiger Endlager.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP 1 Konstruktion und Bau von Triaxialprüfständen mit hochpräziser Axial- und Radiallastregelung.
- AP 2 Kalibrierung und Inbetriebnahme der Prüfstände und der zugehörigen Mess- und Regelungssoftware.
- AP 3 Vergleichende Durchführung und Auswertung von Triaxialversuchen mit klassischer spannungsgeregelter Versuchstechnik und neuartiger verzerrungsgeregelter Versuchstechnik im Spannungsbereich von  $\sigma_v = 1 \text{ MPa} - 6 \text{ MPa}$ .
- AP 4 Numerische Sensitivitätsanalysen zum Einfluss des Kriechverhaltens bei kleinen deviatorischen Spannungen auf das langfristige Trag- und Deformationsverhalten des Gebirges im Umfeld untertägiger Endlager.
- AP 5 Erstellung Schlussbericht.

### **3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse**

AP1: -

AP2: -

AP3: Durchführung von Triaxialkriechversuchen mit neuartiger verzerrungsgeregelter Versuchstechnik

AP4: Diskretisierung ausgewählter Tragsysteme für numerische Sensitivitätsanalysen.

AP5: -

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP1: -

AP2: -

AP3: Weitere Durchführung und Auswertung von Triaxialversuchen

AP4: -

AP5: Erstellung Schlussbericht

### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Düsterloh, U.; Lerche, S. (2023): KRIECHTECH: Entwicklung und Validation einer neuartigen Versuchstechnik für triaxiale Kriechversuche bei geringer deviatorischer Belastung, Vortrag Projektstatusgespräch 2023, Karlsruhe, 06.11.2023 – 07.11.2023.

Düsterloh, U.; Lerche, S. (2024): Entwicklung und Validation einer neuartigen Versuchstechnik für triaxiale Kriechversuche bei geringer deviatorischer Belastung, 4. Tage der Standortauswahl, Goslar, 18./19. 2024.

<b>Auftragnehmer:</b> Karlsruher Institut für Technologie (Universitätsaufgabe)		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 12001A	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (Sandwich-SP1), Teilprojekt A			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.12.2021 bis 30.06.2025		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 323.058,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Katja Emmerich	

## 1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Ziel des Vorhabens ist die Vorhersage des makroskopischen Quelldrucks und die hydro-mechanisch-chemische Modellierung von Bentonitdichteelementen aus nationalen Ca-Bentoniten in Kontakt mit Na-reichen Porenwässern potentieller Wirtsgesteine basierend auf den initialen und sich ändernden Randbedingungen, Hydratationsbedingungen und physiko-chemischen Bentoniteigenschaften. Damit erfolgt der Skalenübergang von der molekularen auf die makroskopische Ebene. Das Vorhaben trägt dazu bei, die Frage zu beantworten, ob die Bentonitbarriere einen Gleichgewichtszustand bei  $t = \infty$  erreicht, wodurch die Ermittlung des Gesamtverhaltens des Systems im SANDWICH-Hauptprojekt verbessert wird. Das Projekt ist ein Verbundprojekt zwischen KIT und RUB. Die Projektleitung liegt bei KIT.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1: Austauschprozesse, Quelldruckheterogenität und Porositätsentwicklung in Smectiten und Bentoniten aus mineralogischer Sicht (KIT)

AP2: Quelldruckheterogenität von Bentonit aus geotechnischer Sicht (RUB). Es werden Elementversuche zum Quelldruckverlauf bei verschiedenen Randbedingungen sowie zu relevanten Pfaden der Saugspannungs-Wassergehaltsbeziehung durchgeführt.

AP3: Modell zur Quelldruckvorhersage (RUB, KIT). Beschreibung des Quellmechanismus anhand eines skalenübergreifenden Modells.

AP4: Koordination/Berichtswesen (KIT)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

**AP1:** In der ersten Hälfte des Jahres 2024 lag das Hauptaugenmerk auf der Verarbeitung und Interpretation der verschiedenen mineralogischen, morphologischen und geotechnischen Charakterisierungsdaten von Calcigel und Secursol-UHP, die im Jahr 2023 erfasst wurden. Die große Menge an Ergebnissen aus verschiedenen Versuchen wurde aufbereitet und in einem Manuskript zusammengestellt. Es wird als Grundlage für alle weiteren Versuche und deren Auswertung dienen. Dafür wurden AFM- (Rasterkraftmikroskopie) und REM- (Rasterelektronenmikroskopie) Aufnahmen abgeschlossen.

Für die Messung des Quelldrucks in den  $\mu$ CT Zellen wurden Tests durchgeführt, um die Empfindlichkeit einiger Parameter zu prüfen. Probenhydratation erfolgte von oben oder von unten in der Quelldruckzelle. Diese Tests zeigten, dass die Position des Wasserzuflusses (Hydratation) in Bezug auf die Richtung der Verdichtung wichtig ist, da die Form der Übergangsphase der Quelldruckkurve durch den Versuchsaufbau beeinflusst wird. Es wurden Hintergrundquelldruckkurven ohne Fluidbeaufschlagung durchgeführt, um die Auswirkungen der Umgebungsfeuchtigkeit auf die aufgezeichneten Quelldruckkurven zu untersuchen. Diese Versuche zeigten einen signifikanten Aufbau des Hintergrunddrucks für Secursol UHP-Bentonit aufgrund der Wechselwirkung mit der Raumluftfeuchtigkeit und der Entspannung der Probe nach der Verdichtung.

Die Wasserdampfadsorptionsisothermen der homoionischen Tonfraktionen bei 20 °C zeigten eine maximale Wasseraufnahme bei 95% relativer Luftfeuchte zwischen 200-300 mg/g, absteigend entsprechend der Zwischenschichtkationen  $\text{Ca}^{2+} > \text{Mg}^{2+} > \text{Na}^+ > \text{K}^+$  für Secursol UHP. Für Calcigel variierte die aufgenommene Menge an Wasser zwischen 130 und 215 mg/g entsprechend  $\text{Ca}^{2+} > \text{Mg}^{2+} \approx \text{Na}^+ > \text{K}^+$ .

**AP2:** siehe Bericht RUB zu Teilprojekt B (02 E 12001B)

**AP3:** siehe Bericht RUB zu Teilprojekt B (02 E 12001B)

**AP4:** Der Projektstand und geplante Weiterarbeiten wurden abgestimmt. Zudem findet ein kontinuierlicher Austausch mit dem Sandwich-HP2 (02E11799A/B/C) statt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

**AP1:** Verbesserung der Reproduzierbarkeit der Quelldruckmessungen, Anpassung der Bildverarbeitung zur Auswertung der  $\mu$ CT Aufnahmen hinsichtlich Gefüge und Porenverteilung und deren Änderung während der Aufsättigung.

Auswertung der Wasserdampfadsorptionsisothermen sowie Durchführung von Enslin-Neff Messungen bei konstanten Temperaturen.

**AP3:** Kinetische Beschreibung der Quelldruckentwicklung als Funktion der Sättigung und des Kationenaustauschs

**AP4:** Einreichung des Papers der mineralogischen und geotechnischen Grundcharakterisierung

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Asaad, A. et al. (2024). The Sandwich Support Project 1 (Sandwich-SP1). Vortrag, Geotechnische Seminarreihe, Institut für Bodenmechanik und Felsmechanik (IBF) am KIT, Juni 2024

Einreichung eines Abstracts für 9th Clay Conference. 25–28 Nov, 2024, Hannover, Germany

<b>Auftragnehmer:</b> Ruhr-Universität Bochum (RUB) – Lehrstuhl für Bodenmechanik, Grundbau und Umweltgeotechnik, 44780 Bochum		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12001B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (Sandwich-SP1), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.12.2021 bis 30.06.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 268.932,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr.-Ing. Wiebke Baille	

## 1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Ziel des Vorhabens ist die Vorhersage des makroskopischen Quelldrucks und die hydro-mechanisch-chemische Modellierung von Bentonitdichteelementen aus nationalen Ca-Bentoniten in Kontakt mit Na-reichen Porenwässern potentieller Wirtsgesteine basierend auf den initialen und sich ändernden Randbedingungen, Hydratationsbedingungen und physiko-chemischen Bentoniteigenschaften. Damit erfolgt der Skalenübergang von der molekularen auf die makroskopische Ebene. Das Vorhaben trägt dazu bei, die Frage zu beantworten, ob die Bentonitbarriere einen Gleichgewichtszustand bei  $t = \infty$  erreicht, wodurch die Ermittlung des Gesamtverhaltens des Systems im SANDWICH-Hauptprojekt verbessert wird. Das Projekt ist ein Verbundprojekt zwischen KIT und RUB. Die Projektleitung liegt bei KIT.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1: Austauschprozesse, Quelldruckheterogenität und Porositätsentwicklung in Smectiten und Bentoniten aus mineralogischer Sicht (KIT)

AP2: Quelldruckheterogenität von Bentonit aus geotechnischer Sicht (RUB). Es werden Elementversuche zum Quelldruckverlauf bei verschiedenen Randbedingungen sowie zu relevanten Pfaden der Saugspannungs-Wassergehaltsbeziehung durchgeführt.

AP3: Modell zur Quelldruckvorhersage (RUB, KIT). Beschreibung des Quellmechanismus anhand eines skalenübergreifenden Modells.

AP4: Koordination/Berichtswesen (KIT)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

**AP1:** siehe Bericht KIT zu Teilprojekt A (02 E 12001A)

**AP2:** Die geotechnische Klassifizierung ist abgeschlossen. Zusätzlich wurde der Reibungswinkel beider Materialien für das trockene und gequollene Granulat durch Rahmenscherversuche in verschiedenen Zuständen bestimmt.

Die Elementversuche mit direkter Bewässerung (volumenkonstante Quelldruckversuche, ödometrische Kompressionsversuche (Be-, Ent- und Wiederbelastung), Quellhebungsversuche) und die Bestimmung der SWCC (Bewässerung, DV=konstant) sind abgeschlossen. Im Berichtszeitraum wurde die Versuchstechnik und die Proben für die Durchführung von saugspannungskontrollierten Quelldruckversuchen mittels *vapour equilibrium technique* (VET) vorbereitet. Dafür wurden Calcigel und Secursol-UHP mittels gesättigter Salzlösungen auf den 1W-Zustand als Initialzustand getrocknet. Während des Versuches wird die relative Feuchtigkeit mittels VET schrittweise erhöht und der zur jeweiligen relativen Feuchtigkeit (RF) bzw. Saugspannung gehörende Quelldruck ermittelt. Der erste Säulenversuch (Calcigel) wurde nach einem Jahr Laufzeit im Berichtszeitraum (März 2024) beendet. Während des Ausbaus der Probe wurde diese systematisch beprobt. An verschiedenen Höhen und radialen Koordinaten wurden der Wassergehalt und die Trockendichte des Materials bestimmt. Anhand dieser Daten kann die räumliche Verteilung des Porenraums und des Sättigungsgrads erfasst werden. Weiterhin wurden kleine Teilproben durch Gefriertrocknung (mit Flüssigstickstoff) in ihrer Struktur bewahrt und stehen für mikrostrukturelle Untersuchungen und Mikroskopaufnahmen zur Verfügung.

**AP3:** Die Kalibrierung der konstitutiven Parameter für das kontinuumsmechanische Modell (BBM, Alonso et al. 1990) in Kombination mit dem hydraulischen Modell (van Genuchten, 1980) anhand der Elementversuche (Oedometerversuche / Quelldruckversuche homogen) wurde durchgeführt. Die Nachrechnung aller Elementversuche (Oedometerversuche / Quelldruckversuche homogen, Quellhebungsversuche) konnte erfolgreich durchgeführt werden. Die Nachrechnung des ersten Säulenversuchs (Calcigel) erfolgt derzeit. Anhand der aufwändigen Instrumentierung des Versuches und der räumlich aufgelösten Versuchsdaten kann die Qualität der Prognose durch die Simulation des Säulenversuchs besser beurteilt werden.

**AP4:** siehe Bericht KIT zu Teilprojekt A (02 E 12001A)

### 4. Geplante Weiterarbeiten

**AP2:** 1) Durchführung Quelldruckversuche mit saugspannungskontrollierter Sättigung über die Dampfphase, 2) Einbau des zweiten Säulenversuches (Secursol) innerhalb des 3. Quartals 2024.

**AP3:** Fortsetzung der Simulation der Säulenversuche.

**AP4: Einreichung** Paper der mineralogischen und geotechnischen Grundcharakterisierung

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

siehe Bericht KIT zu Teilprojekt A (02 E 12001A)

Einreichung zweier Abstracts für 9th Clay Conference. 25–28 Nov, 2024, Hannover, Germany

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 12012A
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Weiterentwicklung von d <sup>3f++</sup> : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE II)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2022 bis 30.09.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.915.790,00 EUR	<b>Projektleiterin:</b> A. Schneider	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Mit d<sup>3f++</sup> steht ein Werkzeug zur Modellierung der thermohalinen Grundwasserströmung und des Radionuklidtransportes durch poröse und geklüftete Medien zur Verfügung, das seit 1995 im Rahmen der BMWi-geförderten Vorhaben GRUPRO, TRAPRO, E-DuR, A-DuR, H-DuR GRUSS und HYMNE entwickelt wurde. Derzeit wird es im Rahmen der Projekte DONUT, SIRUB, SUSE, CHRISTA II und Subrosion-ewG auf endlagerrelevante Fragestellungen angewendet. Ziel von HYMNE II sind die Erweiterung und Verbesserung der Anwendbarkeit von d<sup>3f++</sup> auf Modelle im Sedimentgestein und im Kristallin und eine Erhöhung der Prognosesicherheit. Teilziele sind die Kombination einer verbesserten Darstellung explizit bekannter Klüfte und Störungszonen mit stochastischen Methoden sowohl für DFN- als auch EPM, ein effizienter Umgang mit Datenungleichheiten, die effiziente Modellierung langer Zeiträume, die Berücksichtigung der Salinität in der Permafrost-Modellierung, eine effektivere Modellierung des Nuklidtransportes, numerische Verbesserungen sowie Test und Anwendung des Codes. Die Bearbeitung erfolgt in Kooperation mit der Universität Frankfurt.

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Folgende Arbeitspakete werden von der GRS bearbeitet:

- AP 1: Erweiterung der Anwendbarkeit von d<sup>3f++</sup> für Modelle im Kristallin und Ton
  - AP 1.1 Explizit zu berücksichtigende Klüfte/Störungszonen (DFN) (Konzepte)
  - AP 1.2 Kontinuumsmodelle (EPM) (Konzepte)
  - AP 1.3 Technische Verbesserungen (Konzepte)
- AP 2: Erweiterung des Anwendungsbereiches von d<sup>3f++</sup>
  - AP 2.1 Permafrost: Berücksichtigung der Salinität bei den Phasenübergängen
  - AP 2.2 Radionuklidtransport: Genauere und effektivere Modellierung
- AP 4 Anwendungsrechnungen
  - AP 4.1 Würfel mit Kluffnetzwerk
  - AP 4.2 Äspö site descriptive model
  - AP 4.3 Laborexperiment (Richardsgleichung)
  - AP 4.4 Norddeutscher Küstenraum (Ankopplung Vorfluter)
- AP 5 Wartung des Codes (Unterauftrag)
- AP 6 Projektleitung und Dokumentation

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP 1.1 Für einen Testfall mit einem diskreten Kluftnetzwerk (DFN) mit 42 Klüften in einem würfelförmigen Modellgebiet wurden unter Anwendung des LIMEX-Verfahrens Strömungs- und Transportrechnungen mit 11 Mio. Gitterelementen durchgeführt.  
Ein Algorithmus für das automatisierte Extrudieren niederdimensional abgebildeter Klüfte in äquidimensionale Klüfte wird derzeit implementiert.
- AP 1.2 Es wurde ein einfacher Testfall zur Durchführung von Sensitivitätsanalysen und zur Implementierung der auf Elementgrößen basierten Auswahl von Permeabilitäten entwickelt.
- AP 1.3 Einige Probleme beim Import von Kluftnetzwerken wurden behoben. Der Import von Dateien im vtu-Format unter Beibehaltung der Gebietszuordnungen wurde ermöglicht.
- AP 2.1 Fortsetzung der Modellrechnungen zum Schmelzvorgang in salzhaltigem Grundwasser. Mehrere Unstimmigkeiten konnten mittlerweile beseitigt werden. Schmelzen tritt im Modell jedoch immer noch zu früh ein. Der Bericht über die mathematische Beschreibung der Strömung von salzhaltigem Grundwasser unter Permafrostbedingungen wurde fortgeschrieben. Während die korrekte Form der Erhaltungsgleichungen erarbeitet werden konnte, sind jedoch kaum Daten für die Zustandsgleichungen bei hohen Salzgehalten zu finden.
- AP 4.2 Basierend auf den Kluftstatistikdaten von SKB wurde die Erzeugung von DFN und deren Überführung in Permeabilitätsraster getestet.
- AP 4.3 Die Arbeiten an der Modellierung des Laborexperimentes wurden weitergeführt.
- AP 5 Weitere Bilanzierungsmethoden für Strömung und Transport wurden eingebaut. Das Einlesen von 3d Rasterdateien mit Werten für die Porosität wurde ermöglicht.
- AP 6 Das dritte Projektstatusgespräch fand am 27./28.5.2024 in Präsenz am MSQC in Frankfurt statt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP 1.1 Weitere Automatisierung des Importes von Kluftnetzwerken, Fertigstellung der Implementierung des Algorithmus zum Extrudieren von Klüften.
- AP 1.2 Sensitivitätsanalysen zu Kluftgrößenverteilung und Gitterweiten im Oda-Verfahren. Entwicklung und Implementierung eines Ansatzes zur elementgrößenabhängigen Anwendung von Permeabilitäten.
- AP 2.1 Modellrechnungen zum Schmelzvorgang in salzhaltigem Grundwasser. Die theoretischen Arbeiten zur Berücksichtigung der Salinität bei den Phasenübergängen und die Implementierung werden abgeschlossen. Zustandsgleichungen und konstitutive Beziehungen werden ergänzt. Der Bericht über den mathematischen Rahmen wird vervollständigt.
- AP 4.2 Berücksichtigung der geologischen Einheiten beim EPM und Durchführung von Strömungsrechnungen in d<sup>3f++</sup>.
- AP 4.3 Die Arbeiten an der Modellierung des Laborexperimentes werden abgeschlossen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

keine

<b>Auftragnehmer:</b> Johann Wolfgang Goethe Universität Frankfurt	<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 12012B
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d <sup>3f++</sup> : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE II), Teilprojekt B	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.12.2022 bis 30.11.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 779.892,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Priv.-Doz. Dr. Arne Nägel

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das übergeordnete Ziel des Vorhabens ist die Erweiterung und Verbesserung der Anwendbarkeit von d<sup>3f++</sup> auf Modelle im regionalen Maßstab im Kristallin und im Sedimentgestein. Teilziel 1 (abgebildet in AP1) ist die Erweiterung der Möglichkeiten der Modellierung von Klüften und Störungszonen durch die Anbindung eines Kluftgenerators sowohl für DFN+Matrix- als auch EPM und kombinierte Modelle, um auch statistische Methoden anwenden zu können, sowie die dimensionsadaptive Auflösung größerer Störungszonen in Abhängigkeit vom Rechengitter und von physikalischen Prozessen. Teilziel 2 (abgebildet in AP 2) ist die Erweiterung des Anwendungsbereichs von d<sup>3f++</sup>, z. B. durch die Verfeinerung der Modellierung von Gefrier- und Auftauvorgängen, Verbesserungen in der Modellierung des Nuklidtransportes sowie eine modulare Modellkopplung. Um eine effektivere Modellierung sehr langer Zeiträume zu ermöglichen, soll in Teilziel 3 (abgebildet in AP 3) ein neues, zeitparalleles Lösungsverfahren entwickelt und implementiert werden. Der Umgang mit Datenungleichheiten und die Robustheit der Lösungsverfahren werden weiter verbessert. Durch die Anwendung der kürzlich implementierten sowie der in diesem Vorhaben zu implementierenden Verfahren auf endlagerrelevante Modelle im regionalen Maßstab im Kluft- und Sedimentgestein, mit freier Grundwasseroberfläche und Vorflutern sowie auf Laborexperimente sollen in Teilziel 4 (abgebildet in AP4) die neuen Möglichkeiten des Programms umfangreich getestet, die Prognosesicherheit gestärkt und das Vertrauen in die Modellierung gestärkt werden. Die Ergebnisse werden zusammen mit den Projektpartnern verwertet. Die große Nutzergemeinde des Simulationssystems UG ist eine ausgezeichnete Plattform zur Verbreitung und Verwertung der Projektergebnisse. Es erfolgt eine Zusammenarbeit mit der Gesellschaft für Reaktorsicherheit (GRS), Braunschweig, und der Firma TechSim, Kieselbronn, als Unterauftragnehmerin der GRS. Das Verbundprojekt ist ein Folgevorhaben des BMWi-Projekts vom 01.10.2019 – 30.11.2022 (FKZ 02 E 11809B).

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Verbundvorhabens werden folgende Arbeitspakete vom Institut für Informatik (Modellierung und Simulation) der Universität Frankfurt bearbeitet:

*AP 1: Erweiterung der Anwendbarkeit von d<sup>3f++</sup> für Modelle im Kristallin und Ton (1.1 Explizit zu berücksichtigende Klüfte/Störungszonen (DFN), 1.2 Kontinuumsmodelle (EPM), 1.3 Technische Verbesserungen) <sup>[1]</sup><sub>SEP</sub>*

*AP 2: Erweiterung des Anwendungsbereiches von d<sup>3f++</sup> (2.1. Permafrost: Berücksichtigung der Salinität bei den Phasenübergängen, <sup>[1]</sup><sub>SEP</sub> 2.2. Radionuklidtransport: Genauere und effektivere Modellierung) <sup>[1]</sup><sub>SEP</sub>*

*AP 3: Numerische Verbesserungen (3.1 Zeitparallele Lösungsverfahren, 3.2 Weiterentwicklung des LIMEX-Mehrgitterverfahrens, 3.3 Mehrgitter mit Datenadaptivität, 3.4 Modulare Modellkopplung)*

*AP 4: Anwendungsrechnungen (4.1 Würfel mit Kluftnetzwerk, 4.2 Äspö site descriptive model, 4.3 Laborexperiment (Richardsgleichung), 4.4 Norddeutscher Küstenraum (Ankopplung Vorfluter))*

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

*AP 1: Erweiterung der Anwendbarkeit von d3f++ für Modelle im Kristallin und Ton (1.1 Explizit zu berücksichtigende Klüfte/Störungszonen (DFN), 1.2 Kontinuumsmodelle (EPM), 1.3 Technische Verbesserungen)*

Die Arbeiten wurden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

*AP 2: Erweiterung des Anwendungsbereiches von d3f++ (2.1. Permafrost: Berücksichtigung der Salinität bei den Phasenübergängen, <sup>LIT</sup>2.2. Radionuklidtransport: Genauere und effektivere Modellierung)*

Die Arbeiten wurden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

*AP 3: Numerische Verbesserungen (3.1 Zeitparallele Lösungsverfahren, 3.2 Weiterentwicklung des LIMEX-Mehrgitterverfahrens, 3.3 Mehrgitter mit Datenadaptivität, 3.4 Modulare Modellkopplung)*

Aufgrund der enorm großen geometrischen Matrix ist die Berechnung des Grundwasserflusses durch geklüftetes Gestein eine große Herausforderung, da die große Anzahl an Elementen den Rechenaufwand stark erhöht. Klassische Glättungsverfahren wie gedämpfte Jacobi-, Gauß-Seidel- und ILU-Zerlegung konvergieren bei sehr kleinen Elementen nur sehr langsam, was sich negativ auf die Leistung des Mehrgitterverfahrens auswirkt. Daher musste für solche feinskaligen Probleme eine schnellere Korrekturmethode entwickelt werden. Es wurde mit der Implementierung und Entwicklung eines Homogenisierungskorrektors begonnen. Durch die Umformung des entsprechenden Zellproblems auf dem mikroskaligen Referenzgebiet schafft die Homogenisierungsmethode eine Brücke zwischen dem mikroskaligen Problem und dem makroskaligen Problem auf dem periodischen Gebiet. Die Homogenisierungskorrektur bezeichnet den Prozess der Korrektur der Lösung auf dem mikroskaligen Gebiet durch Interpolation der makroskaligen Fehler unter Verwendung einer Prolongationsmatrix, die durch das zuvor erwähnte Zellproblem und die Methode der finiten Elemente bestimmt wird. Dieser Korrektor wurde für ein Diffusionsproblem in periodischen Gebieten ausgewertet. Leider sanken die Konvergenzraten erheblich, wenn das Gitter verfeinert wurde, d.h., es ist immer noch schwierig die echten Diffusionsprobleme mit diesem Korrektor zu berechnen. Daher arbeiten wir daran, den Makrobereich zu verfeinern, damit mehr Makrofehler berechnet und zur Korrektur der Lösung verwendet werden können, d.h., dass die Gebietsperiodizität nicht mehr existiert. Dies bedeutet, dass sich die Lösungen des Zellproblems entlang der Ränder unterscheiden können. Wir haben zwei Methoden getestet, um dieses Problem der „Nichtidentifizierung“ an den Zellrändern zu beheben. Es hat sich gezeigt, dass der zweite verfeinerbare Korrektor für allgemeine Diffusionsprobleme verwendet werden kann.

*AP 4: Anwendungsrechnungen (4.1 Würfel mit Kluftnetzwerk, 4.2 Äspö site descriptive model, 4.3 Laborexperiment (Richardsgleichung), 4.4 Norddeutscher Küstenraum (Ankopplung Vorfluter))*

Das Boundary Condition Switching Schema muss Austauschflüsse zwischen Oberflächen- und Untergrundbereich berechnen. Dies sollte für unabhängige Geometrien funktionieren. In den frühen Phasen der Entwicklung und Validierung des Algorithmus war es wichtig sicherzustellen, dass die grundlegenden Mechanismen des Algorithmus korrekt und robust sind. Um Fehler aus Berechnungen auszuschließen, die von der Geometrie des Gebiets abhängen, vereinfachten wir zunächst das Problem für passende Geometrien. Dies führte zu unkomplizierten Implementierungen der Randbedingungen. Jedes Problem hängt daher wahrscheinlich mit dem Algorithmus selbst zusammen, sodass die Kernfunktionalität bewertet werden kann. In der nächsten Entwicklungsphase wurde die geometrische Komplexität schrittweise erhöht, wobei sich die Ergebnisse nicht geändert haben. Wir validierten das Modell mithilfe eines vereinfachten Testfalls, bei dem der Oberflächenfluss über die Diffusionswellengleichung modelliert wurde, parametrisiert durch den Oberflächenwasserspiegel. Der Aufbau umfasste einen Erdblock mit einem quadratischen Loch, bei dem der Austausch durch den Boden erfolgte. Der Grundwasserfluss wurde unterhalb des Lochs und der Oberflächenwasserfluss innerhalb des Lochs simuliert. Der Algorithmus verwaltete den Wasseraustausch über die durchlässige Schnittstelle des Gebiets. Die Simulationsergebnisse stimmten mit den Erwartungen überein und zeigten, dass Austauschflüsse zwischen den Gebieten den Druck ausgleichen, bis ein stationärer Zustand erreicht ist. Größere Druckunterschiede führen zu einem erhöhten Fluss über die Schnittstelle.

**4. Geplante Weiterarbeiten**

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

**5. Berichte, Veröffentlichungen**

- keine –

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> TU Clausthal – Lehrstuhl für Geomechanik und multiphysikalische Systeme		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12022A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH <sup>2</sup> M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen - Erweiterung auf multiphysikalische Ansätze und mehrdimensionale Modellgeometrien (BenVaSim II), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.02.2023 bis 31.01.2026	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 523.623,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Eleni Gerolymatou	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Weltweit werden bereits mehrere Simulationscodes für die Modellierung des vollständigen TH<sup>2</sup>M-gekoppelten Materialverhaltens des Wirtgesteins und der geotechnischen Barrieren eingesetzt. Die Funktionalitätsüberprüfung und die Validierung der Simulationswerkzeuge stellen jedoch kontinuierliche Prozesse dar. Bei numerischen Simulationen dieses Komplexitätsgrades können Fehler aus unterschiedlichen Quellen entstehen: (a) Anwenderfehler, (b) Modellfehler und (c) Implementierungsfehler. Die wohl schwerwiegendsten Fehler haben ihren Ursprung in der Implementierung des Programmcodes. In diesem Fall sind die zugrunde liegenden physikalischen Prozesse nicht korrekt implementiert oder es werden nicht nachvollziehbare Annahmen getroffen. Ziel des ersten BenVaSim-Projekts war es, einige der im Bereich der nuklearen Entsorgung am häufigsten eingesetzten Simulatoren im Hinblick auf Punkt (c) zu verifizieren und grundlegende Leitlinien für Punkt (a) zu formulieren, während Punkt (b) derzeit im Rahmen anderer Projekte, z. B. DECOVALEX 2023, untersucht wird. In der zweiten Projektphase sind neben der Fertigstellung der ursprünglichen Ziele von BenVaSim die Erweiterung der Verifikation auf komplexere Geometrien und die Berücksichtigung eines komplexeren Materialverhaltens für das Wirtgestein vorgesehen. Auch der Vergleich zu analytischen oder semianalytischen Lösungen wird fortgeführt und erweitert.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- WP1: Entwicklung generischer Berechnungsmodelle und Definition von Parametersätzen – jeweils für Modelle 1.4 (eindimensional), 2 (Längsschnitt) und 3 (Querschnitt)
- WP2: Durchführung und Auswertung von Modellrechnungen – jeweils für Modelle 1.4 (eindimensional), 2 (Längsschnitt) und 3 (Querschnitt)
- WP3: gemeinsamer Vergleich und Diskussion der Ergebnisse
- WP4: Dokumentation der Ergebnisse und Erstellung eines Syntheseberichts

### **3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse**

Bisher wurden unter den Projektpartnern zehn Treffen durchgeführt. Es wurden geringfügige Änderungen an den bisher bestehenden Modellen im Vergleich zu dem vorangegangenen Berichtszeitraum vorgenommen.

Für die zweidimensionalen Scheibenmodelle Model 3.1 (TM), Model 3.2 (TH<sup>1</sup>) und Model 3.3 (TH<sup>2</sup>) sind bereits Berechnungsergebnisse von den Projektpartnern eingegangen und wurden seitens der Projektkoordination vergleichend gegenübergestellt. Für die oben genannten Modelle wurden Varianten mit einem anisotropen Wirtgestein definiert. Die betreffenden TH<sup>2</sup>M-Parameter und die Datenblätter wurden mit den Partnern während des letzten Projekttreffens des Berichtszeitraums diskutiert.

Das auf Grund von Unschlüssigkeit bezüglich Modellgeometrie und Randbedingungen zurückgestellte Model 2 wurde neudefiniert. Ein Datenblatt und die entsprechenden Ergebnisse von Pilotsimulationen zu Model 2.1 (TM) wurden bei dem letzten Projekttreffen des Berichtszeitraums vorgestellt und mit den Partnern besprochen. Es ist vorgesehen, bei Model 2 eine vergleichende prozessorientierte Vorgehensweise wie bei Model 3 durchzuführen.

Die Diskrepanzen zwischen den Simulationsergebnissen bei Model 1.4 konnten deutlich reduziert werden. Um die Gründe der noch existierenden Unterschiede der Berechnungsergebnisse zu determinieren, wurde der Fokus auf die Dichtefunktion des Wassers gelegt. Hierfür wurde seitens der TU Clausthal zu den bereits vorhandenen Tabellen für die thermodynamischen Eigenschaften für Wasser und Wasserdampf (IAPWS R7-97) in dem verwendeten Simulator TOUGH3 zusätzlich eine parameterabhängige Wasserdichtefunktion implementiert und bereits erste Simulationen in Absprache mit den Projektpartnern durchgeführt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Für das kommende Halbjahr werden weitere aktualisierte Simulationsergebnisse der Partner für Model 1.4 und für die Simulationsvarianten von Model 3 erwartet. Ein Ziel wird die Analyse der Diskrepanzen der Berechnungsergebnisse sein. Hierzu wird der Fokus auf die Untersuchung der thermohydraulischen Eigenschaften der Wasser- und Gasphase gelegt. Aufbauend auf den Diskussionen während des letzten Projekttreffens des Berichtszeitraums wird eine Weiterentwicklung von Model 2 und von Model 3 (anisotrop) angestrebt sowie erste Simulationsergebnisse der Partner zu diesen Modellen erwartet. Weiterhin wird ein ausführlicher Partnervergleich mit einer verknüpften Interpretation der Berechnungsergebnisse angestrebt.

### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Noch keine vorhanden.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12022B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH <sup>2</sup> M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen - Erweiterung auf multiphysikalische Ansätze und mehrdimensionale Modellgeometrien (BenVaSim II), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.02.2023 bis 31.01.2026	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 512.650,00 EUR	<b>Projektleiterin:</b> Larissa Friedenber	

## 1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Gesamtziel des Vorhabens ist die Weiterverfolgung der in dem Vorgängerprojekt BenVaSim-I entwickelten Idee des Benchmarkings mit einfachen Modellgeometrien und Betrachtung der Basisprozesse, die jeder komplexeren Modellierung zu Grunde liegen. Die Ergebnisse sollen mit analytischen oder semi-analytischen Lösungen verglichen werden, um die Rückverfolgbarkeit zu gewährleisten. Zunächst sollen die fehlenden Lücken für die thermischen Prozesse und deren Wechselwirkungen mit hydraulischen und mechanischen Prozessen im Eindimensionalen geschlossen werden. Die gewonnenen Erkenntnisse über die grundlegenden Prozesse werden im nächsten Schritt auf zweidimensionale Modelle erweitert.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

### AP 1: Entwicklung generischer Simulationsmodelle und Definition von Parametersätzen

Für das Benchmarking müssen generische Parametersets und Modelle entwickelt werden, welche grundlegende Prozesse in einem Endlager für wärmeentwickelnden, radioaktiven Abfall berücksichtigen. Für jedes Modell sollen verschiedene Szenarien definiert werden, welche Änderungen in den Parametern oder Randbedingungen beinhalten.

### AP 2: Durchführung und Bewertung von Modellrechnungen

Die in AP1 entwickelten Modelle und Szenarien sollen in diesem Arbeitspaket angewendet werden. Hierbei wird der Modellierungsprozess, die Performance der numerischen Berechnung und die Ergebnisse dokumentiert.

### AP 3: Vergleich und Diskussion der Ergebnisse

In diesem Arbeitspaket werden zuerst Bewertungsgrößen für die Ergebnisvergleiche definiert. Dann sollen die Ergebnisse der einzelnen Modelle aller Partner verglichen und im Kollektiv diskutiert werden.

### AP 4: Synthese und Präsentation der Endergebnisse

In AP4 werden die Ergebnisse der Arbeitspakete dokumentiert und zusammengefasst sowie die Richtung für die systematische Lösung der verbleibenden Fragen festgelegt. Die Ergebnisse sollen laufend international präsentiert werden.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum fanden 5 virtuelle Meetings (30.01, 29.02, 19.03, 09.04, 03.06.) statt. In den Meetings wurden Ergebnisse zu den bisher bearbeiteten Modellen verglichen und diskutiert. Besonders durch den Ergebnisvergleich für das eindimensionale Modell 1.4 wird nun ein Fokus auf die Implementierung der Fluideigenschaften in den unterschiedlichen Simulationscodes gelegt und Unterschiede herausgearbeitet. Erste Ergebnisse wurden auch für das zweidimensionale Modell 3 verglichen. Hier wird die Modellierung mit steigender Komplexität durchgeführt (TM, TH, TH<sup>2</sup>, THM, TH<sup>2</sup>M).

Die GRS unterstützt die Projektkoordinatorin TU Clausthal bei der Definition der Modelle und Vorgehensweise, außerdem beteiligt sie sich mit zwei Simulationscodes an den Modellierungen: CODE\_BRIGHT und Comsol Multiphysics.

Im Berichtszeitraum wurde aufbauend auf den vorherigen Ergebnissen am eindimensionalen Modell (Modell 1.4) gearbeitet und die Ergebnisse der TH<sup>2</sup>M-Simulation modifiziert. Insbesondere wurde ein Vergleich der in den verschiedenen Simulationscodes hinterlegten Fluideigenschaften (z.B. Dichte und Viskosität) und deren Druck- und Temperaturabhängigkeit begonnen. Dabei wurde ein Vorgehen entwickelt, um die in einigen Simulationscodes hinterlegten Lösungseigenschaften nach dem Standard IAPWS-97 durch lineare Anpassung (bezüglich Druck und Temperatur) näherungsweise auch in CODE\_BRIGHT zu realisieren. Dies führte zu einer Annäherung der Simulationsergebnisse verschiedener Codes. Zudem wurde mit der Modellierung des ersten zweidimensionalen Modells (Modell 3) begonnen, welches eine „Plane Strain“ Geometrie besitzt. Zunächst wurde eine thermisch-mechanisch gekoppelte Simulation durchgeführt mit guter Übereinstimmung der Ergebnisse unterschiedlicher Codes. Anschließend wurde mit der thermisch-hydraulisch (TH und später TH<sup>2</sup>) gekoppelten Simulation begonnen und auch hierfür das oben beschriebene Vorgehen zur Vereinheitlichung der Fluideigenschaften angewandt.

Die bisherigen Ergebnisse der Simulationen mit CODE\_BRIGHT wurden auf dem „Trust in Models“-Workshop des BASE in Berlin (13-14.03.2024), sowie dem CODE\_BRIGHT-Workshop am 22.05.2024 in Barcelona präsentiert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Bearbeitung der einzelnen APs entsprechend der Vorhabensbeschreibung.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Hinze, M. & Friedenber, L. (2024): THM simulation of processes in generic final repository concepts. CODE\_BRIGHT Workshop, Barcelona, 22.05.2024.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 12032	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Methoden zur experimentellen und numerischen Analyse der geologischen Barriere eines Endlagers in tonreichen Sedimentgesteinsformationen (MAGNUS)			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2022 bis 30.09.2025		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.462.465,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Marvin Middelhoff	

## 1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Gesamtziel des MAGNUS-Vorhabens ist die Evaluierung, Optimierung und Standardisierung von experimentellen sowie numerischen Methoden, die zur Analyse des richtungs- und zeitabhängigen Verhaltens von tonreichem Sedimentgestein unter thermischen, hydraulischen und mechanischen (THM) Randbedingungen genutzt werden. Die Zielstellungen der verschiedenen Arbeitspakete des MAGNUS-Vorhabens sind so miteinander gekoppelt, dass das multimaßstäbliche Materialverhalten einer (repräsentativen) tonreichen Sedimentgesteinsformation (Sandige Fazies des Opalinustons (OPA-S), FL Mont Terri, CH) unter Verwendung eines nichtlokalen zeitabhängigen anisotropen THM gekoppelten Stoffmodells (Mánica-Modell), einschließlich der Berücksichtigung eines qualifizierten Eingangsparametersatzes, reproduziert werden kann.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

### AP 1: Probenahme und Probelagerung

Das Ziel des **UAP 1.1** ist die Evaluierung, Optimierung und Standardisierung von Methoden zur Entnahme von repräsentativen Probenmaterial aus OPA-S. Im Rahmen dieses UAP wird ein Mini-Mine-By (MMB)-Experiment in situ durchgeführt. **UAP 1.2** beabsichtigt die Konzeptionierung und Evaluierung von Behältern, die den Transport und die langfristige Lagerung von Probenmaterial aus tonreichem Sedimentgestein ermöglichen.

### AP 2: Methodenentwicklung zur experimentellen Analyse im REV-Maßstab

Das Ziel des **UAP 2.1** ist die Evaluierung, Optimierung und Standardisierung von experimentellen Methoden zur Analyse des richtungs- und zeitabhängigen Materialverhaltens von OPA-S im Maßstab des repräsentativen elementaren Volumens (REV-Maßstab) unter abstrahierten THM-Randbedingungen. Im Rahmen dieses UAP werden insbesondere zeitunabhängige sowie zeitabhängige triaxiale Kompressionsexperimente (TC- und TCc-Experimente) durchgeführt. Das Ziel des **UAP 2.2** ist die Generation der physikalischen Eingangsparameter für das Mánica-Modell

### AP 3: Methodenentwicklung zur numerischen Analyse in multiplen Maßstäben

**UAP 3.1** umfasst drei Zielstellungen: Es werden zunächst numerische Modelle mittels des Finite-Elemente-Codes „CODE\_BRIGHT“ im Pre- und Postprozessor „GiD“ generiert. Anschließend werden sie in Verbindung mit dem Mánica-Modell verwendet, um die zuvor durchgeführten Experimente unter Berücksichtigung der Initial- sowie Randbedingungen zu reproduzieren. Während der Reproduktion der Experimente werden die numerischen Eingangsparameter ermittelt und der Eingangsparametersatz für den REV-Maßstab qualifiziert. Im Rahmen des **UAP 3.2** wird der Eingangsparametersatz in Verbindung mit dem Mánica-Modell zur Verbesserung der Simulationen von In situ-Experimenten verwendet.

### AP 4: Dokumentation

In AP4 werden die Ergebnisse der Arbeitspakete dokumentiert und zusammengefasst sowie verbleibenden Fragenstellungen synthetisiert.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Es wird im Rahmen des **UAP 1.1** das MMB-Experiment in der OPA-S durchgeführt. Das Experiment umfasst folgende Phasen: 1. Prä-Experiment-Monitoring der Porendrücke (einschließlich der Bestimmung der Mindest-Probenahme-Teufe) mittels Mini-Piezometern, die in unterschiedlichen Teufen installiert worden sind, 2. Kerngewinn (MMB-Experiment) und 3. Post-Experiment-Monitoring der Porendrücke. Phasen 1 und 2 sind erfolgreich abgeschlossen worden. Auch sechs Monate nach Kerngewinn zeigt sich keine Stabilisierung der Porendrücke in einer Teufe von 12m. Sie steigen mit einer konstanten Rate weiter an.

Im Rahmen des **UAP 1.2** sind zwei Behälter-Typen konzipiert und produziert worden: 1. PE-Druckbehälter und 2. gespanntes PE-Gebinde (bestehend aus Zurrurt, PU-Schaummatte und PE-Rohr). Während des Kerngewinns ist die Methodik zu derer Konditionierung erfolgreich getestet und etabliert worden. Die Behälter-Typen werden zurzeit im Hinblick auf ihre Funktionsweise und langfristige Wirksamkeit hin getestet.

Es werden im Rahmen des **UAP 2.1** experimentelle Methoden zur Analyse des Materialverhaltens unter relevanten Initial- und Randbedingungen konzipiert, optimiert und standardisiert. Beispielsweise werden zurzeit Methoden zur Herstellung quasi-ungestörter Prüfkörper sowie zur Analyse der Retentionseigenschaften der Materialien optimiert und standardisiert. Gleichzeitig werden TC- und TCc-Experimente durchgeführt. Im Berichtszeitraum ist erfolgreich ein Vergleich verschiedener Experimentprotokolle durchgeführt worden.

Im Rahmen des **UAP 2.2** werden physikalische Eingangsparameter für das Mánica-Modell generiert. Es ist im Berichtszeitraum mit derer Generierung angefangen worden.

Um die in UAP 2.1 durchgeführten Experimente repräsentativ numerisch abzubilden, werden im Rahmen des **UAP 3.1** numerische Modelle mittels CODE\_BRIGTH und GiD entwickelt. Im Berichtszeitraum sind erste numerische Modelle entwickelt worden, welche anschließend mit den Eingangsparametern bestückt werden.

Im Berichtszeitraum sind keine Arbeiten im Rahmen des **UAP 3.2** durchgeführt worden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Bedeutende Schwierigkeiten bzw. Probleme führen zu einem verzögerten Anlaufen der experimentellen Arbeiten. Es besteht daher die Notwendigkeit der gleichzeitigen Bearbeitung mancher UAP.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- keine -

<b>Auftragnehmer:</b> BGE TECHNOLOGY GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12042A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Erarbeitung einer Methodik zur systematischen Ableitung von zu erwartenden und abweichenden Entwicklungen im Kristallingestein in Deutschland und exemplarische Anwendung als Grundlage zur Bewertung des sicheren Einschlusses unter Berücksichtigung von Optimierungsmaßnahmen (CHRISTA-III), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3.2: Methodische Grundlagen der Nachweisführung C3.3: Werkzeuge der Sicherheitsanalysen		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2022 bis 31.10.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 418.017,25 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Christian Müller	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Die Sicherheitsbewertungen, die regulatorisch gefordert sind, sollen auf Basis erwarteter und abweichender Endlagerentwicklungen erfolgen. Ein wesentliches Ziel dieses Vorhabens ist daher die Entwicklung einer Methodik zur systematischen Ableitung dieser Endlagerentwicklungen sowie ein Anwendungstest am Beispiel eines generischen Kristallinstandortes. In engem Zusammenhang mit den Endlagerentwicklungen werden Optimierungsmöglichkeiten für das Endlagersystem abgeleitet sowie Optionen zur Stärkung der Robustheit des Systems. Weiterentwicklungen von Konzepten zur Integritätsanalyse kristalliner Gesteine inklusive einer Analyse damit verbundener Unsicherheiten runden das Vorhaben ab.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP 1: Methodik zur Ableitung von Entwicklungen für Endlagersysteme, deren Sicherheit auf technischen und geotechnischen Barrieren beruht
- AP 2: Bewertung einer Kombination bisheriger Einlagerungsoptionen
- AP 3: Weiterentwicklung eines Modellierungskonzepts zur Analyse der Integrität eines ewG im Kristallingestein im Zusammenhang mit der Kombination von Einlagerungsoptionen
- AP 4: Optimierungsmöglichkeiten im Endlagersystem

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: In diesem AP soll geklärt werden, wie sich Entwicklungen systematisch und nachvollziehbar ableiten lassen. Die Grundlagen der vorhandenen Methodik sind auch auf Kristallingesteine anwendbar. Für die Szenarientwicklung sind aber gesteins- und konzeptspezifische Anpassungen erforderlich. Zur Beschreibung des Endlagersystems wurde eine neue FEP Datenbank entwickelt und mit den erforderlichen Informationen gefüllt. Grundlagen der neuen Methodik zur Szenarientwicklung sind, neben dem FEP-Katalog, die Initialgruppen, die jeweils wichtige Barrierensysteme und ihr Umfeld beschreiben. Auf die Barrieren wirken in der Nachverschlussphase des Endlagers eine Vielzahl von Prozessen aus dem Nah- und dem Fernfeld. Außerdem laufen Prozesse ab, die zu einer Radionuklidmobilisierung und einem – transport führen. Die Intensität der genannten Prozesse ist entscheidend für die Systementwicklung und wird in Ausprägungsdokumenten abgeleitet, in denen die Wechselwirkungen von Komponenten und Prozessen über mehrere Ebenen beschrieben werden. Diese Ausprägungsdokumente wurden für alle 4 Initialgruppen erstellt. Damit liegen die Grundlagen vor, um im nächsten Schritt die erwarteten Entwicklungen abzuleiten.

AP4: Ziel dieses APs sind Untersuchungen zu Optimierungsmöglichkeiten eines Endlagersystems gemäß EndSiAnfV. Bei der Optimierung der Langzeitsicherheit wird in CHRISTA-III über die Endlagerentwicklung eine Unterscheidung zwischen „sicherer Einschluss“ und „Robustheit“ vorgenommen. Eine Optimierung des Sicherheitskonzeptes bezüglich Robustheit betrachtet vorrangig die abweichenden Entwicklungen (nachrangig zu erwartende Entwicklungen), während der „sichere Einschluss“ vorrangig die zu erwartenden Entwicklungen (nachrangig abweichende Entwicklungen) betrachtet. Auf Basis dieser Unterscheidung und mit Hilfe des FEP-Katalogs wurde eine Methodik entwickelt, mit der sich systematisch und begründbar Optimierungsmaßnahmen ableiten lassen. Die Anwendung der Methodik wurde exemplarisch für die auf die Behälter einwirkenden Prozesse und durch die infolge der Änderungen am Behälter beeinflussten FEP in der Betriebs- und Nachverschlussphase gezeigt. Zusätzlich wurde eine Recherche zur Rolle der Optimierung in internationalen Entsorgungsprogrammen vorgenommen und mit der in CHRISTA-III festgelegten Begriffsdefinition verglichen. Es zeigt sich, dass der Begriff Optimierung unterschiedlich definiert ist und häufig Maßnahmen, die über die normale Auslegung der Komponenten hinausgehen, als Optimierungsmaßnahmen bezeichnet werden. Des Weiteren wird international der Begriff Optimierung nicht nur mit Sicherheit, sondern auch mit anderen Aspekten verknüpft (z.B. Kosten, Zeit).

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Die erwartete Entwicklung soll auf Grundlage des geologischen Modells, des Sicherheitskonzeptes, des Endlagerkonzeptes und der Initialgruppen beschrieben werden. Zudem ist eine Methodik für die Ableitung abweichender Entwicklungen zu beschreiben und exemplarisch zu erproben.

AP2: Die bereits durchgeführten Berechnungen am Basisfall sollen um Konzeptkombinationen erweitert werden. Durch Parametervariationen, welche zusätzlich zu den zu erwartenden Entwicklungen auch abweichende Entwicklungen repräsentieren, soll ein Sicherheits- bzw. Robustheitsgewinn quantifiziert werden.

AP4: Bisher erfolgte nur eine qualitative Nennung von möglichen Optimierungsmaßnahmen, aber keine Aussage zur Methodik, wie der Optimierungserfolg auch quantifiziert werden kann. Mögliche Strategien, wie dies gelingen könnte, sollen genannt und bewertet werden.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Lommerzheim et al. (2024): A systematic approach to scenario development for long-term safety assessments for a high-level waste (HLW) repository concept in German crystalline rock. ABSTRACT zum IGSC Safety Case Symposium 2024. Akzeptiert als Vortrag.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> GRS gGmbH, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12042B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Erarbeitung einer Methodik zur systematischen Ableitung von zu erwartenden und abweichenden Entwicklungen im Kristallingestein in Deutschland und exemplarische Anwendung als Grundlage zur Bewertung des sicheren Einschlusses unter Berücksichtigung von Optimierungsmaßnahmen (CHRISTA-III), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3.2: Methodische Grundlagen der Nachweisführung C3.3: Werkzeuge der Sicherheitsanalysen		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2022 bis 31.10.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 612.785,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Mayer	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In CHRISTA-II wurde ein methodisches Vorgehen zur sicherheitlichen Bewertung von Endlagersystemen im Kristallin in Deutschland für die drei in der Machbarkeitsstudie CHRISTA identifizierten Einlagerungsoptionen „überlagernder ewG“ (üewG), „multipler ewG“ (mewG) und „modifiziertes KBS-3-Konzept“ (mKBS3) erarbeitet und für generische Endlagermodelle exemplarisch getestet. Aufbauend auf den in CHRISTA-II abgeleiteten FEP-Katalogen sollen im Verbundprojekt von BGR, BGETEC und GRS CHRISTA-III erstmalig exemplarisch zu erwartende und abweichende Entwicklungen sowie Maßnahmen zur Optimierung des Endlagersystems basierend auf den diesen abgeleitet werden. Die bisherigen Ergebnisse legen nahe, dass die Anwendung eines Systems aus (geo-)technischen Barrieren als wesentliche Barrieren scheinbar Vorteile hinsichtlich der Bewertung der Sicherheit des Endlagersystems hätte. Die zusätzliche Ausweisung eines oder mehrerer ewG könnte hier allerdings zu einer erhöhten Robustheit des Endlagersystems führen. Daher sollen die bisherigen Endlageroptionen kombiniert und damit der mögliche Robustheitsgewinn mithilfe von Integritätsprüfungen und Dosisabschätzung dargestellt werden. Eine Bewertung des Einflusses der Kluftverteilung auf die Integrität der geologischen Barriere soll vorgenommen und Optimierungsmöglichkeiten sollen dargestellt und bewertet werden.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Vorhabens werden folgende Arbeitspakete bearbeitet:

- AP 1: Methodik zur Ableitung von Entwicklungen für Endlagersysteme, deren Sicherheit auf technischen und geotechnischen Barrieren beruht
- AP 2: Bewertung einer Kombination bisheriger Einlagerungsoptionen
- AP 3: Weiterentwicklung eines Modellierungskonzepts zur Analyse der Integrität eines ewG im Kristallingestein im Zusammenhang mit der Kombination von Einlagerungsoptionen
- AP 4: Optimierungsmöglichkeiten im Endlagersystem
- AP 5: Dokumentation

Die GRS ist an den Arbeiten in AP 1 - 5 beteiligt und federführend im AP2.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP 2: Am 14.06. fand ein AP übergreifendes Projektgespräch statt. Dort wurde der Arbeitsstand und das weitere Vorgehen gemeinsam diskutiert. Derzeit wird eine Kombination des Referenzkonzeptes (mKBS3-Konzept) mit einem mewG-Konzept aufgebaut. Es soll die Auswirkung verschiedener ewG-Mächtigkeiten berücksichtigt werden. Die jährliche Anzahl der Atome (JAN) nach § 4 und die Dosis nach § 7 EndSiAnfV sowie die für die beiden Indikatoren wesentlichen Radionuklide werden berechnet.
- AP 3: Die Modellparameter wurden mit AP 2 abgestimmt und eine mögliche Abweichung in der Berechnung bewertet. Für das 3D Modell wurde eine Log-Normal-Verteilung für die Permeabilität ermittelt. Zur Interpretation der räumlichen Kontinuität wurde eine Gaußsche Korrelation in der Permeabilität eingesetzt. Die Arbeiten wurden auf dem AP übergreifenden Projektgespräch vorgestellt.
- AP 4: Ein erstes Konzept zur Durchführung einer Optimierung im Rahmen des Standortauswahlverfahrens wurde erarbeitet, diskutiert und dokumentiert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP 2: Es ist geplant, die Ergebnisse der Kombination des Referenzkonzeptes mit dem mewG-Konzept auf einem Projekttreffen zu diskutieren. Anschließend wird eine Kombination mit einem überlagernden Deckgebirge betrachtet und ein möglicher Sicherheitsgewinn quantifiziert. Als Ausgangspunkt wird die in AP 1 identifizierte erwartete Entwicklung unterstellt sowie der Zeitpunkt und die Anzahl ausfallender Behälter variiert. Eine Berechnung des sicheren Einschlusses erfolgt in einem ersten Schritt mit Claypos. Anschließend soll auch eine vergleichende Berechnung mit NaTREND erfolgen.
- AP 3: Es ist geplant, statistische Permeabilitätsverteilungen auf Grundlage der ODA-Permeabilität zu bestimmen. Diese werden dann für Variationsberechnungen genutzt und mit der ursprünglich angesetzten ODA-Permeabilität des Referenz-Berechnungsfalls verglichen, um die Einflüsse der Permeabilitätsverteilung zu untersuchen.
- AP 4: Weiterentwicklung des Konzeptes zur Durchführung einer Optimierung im Rahmen des Standortauswahlverfahrens.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Lommerzheim et al. (2024): A systematic approach to scenario development for long-term safety assessments for a high-level waste (HLW) repository concept in German crystalline rock.

ABSTRACT zum IGSC Safety Case Symposium 2024. Akzeptiert als Vortrag.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstrasse 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12052A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (Teilprojekt HZDR im Verbundvorhaben KuRSiv)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C1.1 Geowissenschaftliche und geotechnische Methoden zur Standorterkundung (Feld und Labor) C1.3 Methodische Grundlagen eines Standortvergleichs		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2023 bis 30.06.2026	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 557.539,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Vinzenz Brendler	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt KuRSiv (Partner: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, und Institut für Nukleare Entsorgung des KIT (KIT-INE)) untersucht die Rückhaltung von Radionukliden (RN) an Mineralphasen in Gegenwart von Aluminium und anderen Metallkationen, die aus der Auflösung der Minerale entstehen. Der Schwerpunkt der experimentellen Arbeiten ist zum einen auf das Verständnis der Nukleation, dem ersten Schritt in der Bildung von Mineralphasen, gerichtet. Weiterhin soll die Sorption der RN z.B. aufgrund von Auflösung der Mineralphasen als kompetitiver Prozess mit Metallionen aus der Mineralauflösung oder generell dem Porenwasser beschrieben werden, die mit den RN um Sorptionsplätze konkurrieren. In Kombination soll KuRSiv die für eine realistische Beschreibung der RN-Rückhaltung in hochkomplexen Systemen notwendigen Modelle bereitstellen inklusive einer realistischen Parametrisierung. Dies soll die Vorhersagequalität und Praktikabilität entsprechender Modellierungen erhöhen und damit das Vertrauen der Öffentlichkeit, der wissenschaftlichen Gemeinschaft und der Aufsichtsbehörden in solche Vorhersagen stärken.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP 1: State-of-the-Art: Bewertung
- AP 2: Kompetitive Effekte
- AP 3: Oberflächenausfällungen
- AP 4: Oberflächenpotential und -ladung (ohne direkte HZDR-Beteiligung)
- AP 5: Thermodynamische Daten & Modell
- AP 6: Proof-of-Concept
- AP 7: Koordination, Wissenstransfer

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Beschaffung und Charakterisierung einer  $^{26}\text{Al}$  Lösung (Kooperation mit TU Dresden).

Reflektivitätsmessungen höherer Th-Konzentrationen in Abwesenheit von Nitrat (in Grenoble an der ESRF - ROBL Beamline), Auswertung wurde fortgesetzt.

AP2: Umfassende Charakterisierung des Ausgangsmaterials Hämatit. Sorptionsreihen von  $\text{Al}^{3+}$  (50  $\mu\text{M}$ , 100  $\mu\text{M}$ ) und  $\text{Eu}^{3+}$  (10  $\mu\text{M}$ ) an Hämatit ergaben Absorptionskanten bei pH  $\sim 4,0$  für  $\text{Al}^{3+}$  und pH  $\sim 5,3$  für  $\text{Eu}^{3+}$ . Untersuchung des Einflusses verschiedener Parameter, wie Ionenstärke ( $[\text{NaCl}] = 0,1 \text{ M}, 0,01 \text{ M}$ ) und S/L (3 g/l, 0,5 g/l) auf die Sorption. Bestimmung der Zeta-Potentiale von Hämatit in An- und Abwesenheit von  $\text{Al}^{3+}$ . Untersuchungen zur Speziation und Präzipitation von  $\text{Al}^{3+}$ .

Erste Untersuchungen zur kompetitiven Sorption von  $\text{Al}^{3+}$  (100  $\mu\text{M}$ ) und  $\text{Eu}^{3+}$  (10  $\mu\text{M}$ ) an Hämatit und zur Sorption von  $\text{Ga}^{3+}$  (100  $\mu\text{M}$ ) an Hämatit als chemischen Analogon für  $\text{Al}^{3+}$ .

AP3: Untersuchung möglicher Al-Sekundärphasen an K-Feldspat durch Reflektivitätsmessungen (ROBL Beamline und an der APS in Chicago). Auswertung zum Al-Experiment mit Ga-Spikes ausstehend.

Vorbereitung des Forschungsaufenthalts an der Universität Durham bei Prof. Voitchovsky zur Charakterisierung mittels hochaufgelösten AFM Messungen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Sorptionsversuche von  $^{26}\text{Al}$  an K-Feldspat an der TU Dresden.

AP2: Weiterführende Untersuchungen zur kompetitiven Sorption von  $\text{Al}^{3+}$  und  $\text{Eu}^{3+}$  an Hämatit mit unterschiedlichen Konzentrationen und Zeitpunkten der Zugabe der verschiedenen Ionen. EXAFS-Untersuchungen zur Struktur gebildeter Ga-Oberflächenkomplexe. Aufnahme von Isothermen für die Sorption von  $\text{Al}^{3+}$  an Hämatit.

Übertragung der Arbeiten auf das System  $\text{Fe}^{3+}$  an Korund.

Fertigstellung der Auswertung der Reflektivitätsdaten.

AP3: Forschungsaufenthalt zu AFM-Untersuchungen an der Universität Durham bei Prof. Voitchovsky

Anfertigung diverser Manuskripte

AP5: Entwicklung eines thermodynamischen Modells zur Sorption von  $\text{Al}^{3+}$  an Hämatit

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Lessing, J., Neumann, J., Lützenkirchen, J., Bok, F., Brendler, V., Stumpf, T., Schmidt, M. "Influence of Al on the Retention of Trivalent Actinides and their Homologues in Feldspar". Vortrag, ACS Spring Meeting, 17.-21.03.2024, New Orleans, USA.

Lessing, J., Neumann, J., Lützenkirchen, J., Bok, F., Moisei-Rabung, S., Schild, D., Brendler, V., Stumpf, T., Schmidt, M. "Natural and synthetic plagioclases: Surface charge characterization and sorption of trivalent lanthanides (Eu) and actinides (Am, Cm)" Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects 688 (2024), 133529.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 12052 B	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (Teilprojekt GRS im Verbundvorhaben KuRSiv)			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C1.1 Geowissenschaftliche und geotechnische Methoden zur Standorterkundung (Feld und Labor) C1.3 Methodische Grundlagen eines Standortvergleichs			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2023 bis 30.06.2026		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 721.047,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Susan Britz	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt KuRSiv (Partner: Institut für Ressourcenökologie des HZDR (HZDR-IRE) und Institut für Nukleare Entsorgung des KIT (KIT-INE)) untersucht die Rückhaltung von Radionukliden (RN) an Mineralphasen in Gegenwart von Aluminium und anderen Metallkationen, die aus der Auflösung der Minerale entstehen. Der Schwerpunkt der experimentellen Arbeiten ist zum einen auf das Verständnis der Nukleation, dem ersten Schritt in der Bildung von Mineralphasen, gerichtet. Weiterhin soll die Sorption der RN z.B. aufgrund von Auflösung der Mineralphasen als kompetitiver Prozess mit Metallionen aus der Mineralauflösung oder generell dem Porenwasser beschrieben werden, die mit den RN um Sorptionsplätze konkurrieren. In Kombination soll KuRSiv die für eine realistische Beschreibung der RN-Rückhaltung in hochkomplexen Systemen notwendigen Modelle bereitstellen inklusive einer realistischen Parametrisierung. Dies soll die Vorhersagequalität und Praktikabilität entsprechender Modellierungen erhöhen und damit das Vertrauen der Öffentlichkeit, der wissenschaftlichen Gemeinschaft und der Aufsichtsbehörden in solche Vorhersagen stärken.

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP 1: State-of-the-Art: Bewertung
- AP 2: Kompetitive Effekte
- AP 3: Oberflächenausfällungen
- AP 4: Oberflächenpotential und -ladung (ohne direkte HZDR-Beteiligung)
- AP 5: Thermodynamische Daten & Modell
- AP 6: Proof-of-Concept
- AP 7: Koordination, Wissenstransfer

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2/3: Zur Probencharakterisierung wurden zahlreiche BET-Analysen zur Oberflächenbestimmung der verschiedenen, gemahlene Mineralproben Albit, K-Feldspat und Quarz durchgeführt. Mittels XRD wurde Albit als Mineralphase, wie vom Lieferanten bezeichnet, bestätigt.

Es wurden Sorptionsdatenreihen mit Eu und Y mit Albit erhoben. Der Vergleich mit bereits vorhandenen Sorptionsdaten anderer Feldspäte (K-Feldspat, Plagioklase, Anorthit) weist deutliche Unterschiede auf. Weiterhin wurden Batchexperimente mit Eu und MIN-U-SIL 5 sowie Merck Quarz durchgeführt.

Mehrstufige Auslaugversuche von Quarz G20 EAS extra in 10 mM NaCl führten zu keiner Reduktion der Al und Fe Verunreinigung. Möglichst Al- und Fe-freie Quarzoberflächen sind erforderlich, um im Folgenden Al-/Fe-Sorptionsexperimente und kompetitive Sorptionsuntersuchungen durchführen zu können. Auch andere Quarzproben (MIN-U-SIL, Merck Quarz) führten beim Leaching innerhalb von 24 h zu unpraktikabel hohen Al und Fe Konzentrationen in Lösung.

AP 4: Erfolgreiche Erstellung einer Feststofftitrationsroutine (808 Titrande, Tiamo 3.0) und Durchführung erster potentiometrischer Titrations mit Orthoklas ( $< 63 \mu\text{m}$ ).

AP 5: Die Planung für den ersten Modelling Workshop (WS) wurde initiiert. Der WS soll voraussichtlich im Mai 2025 in Braunschweig stattfinden und ca. 20 Teilnehmer:innen die Möglichkeit bieten über experimentelle Aspekte und über die Abbildung von Oberflächenkomplexierung, -ausfällung sowie kinetisch getriggerte Oberflächenreaktionen in Modellen zu diskutieren.

AP7: Das zweite Arbeitstreffen hat erfolgreich am 28./29.05.2024 in Braunschweig stattgefunden, an dem alle Verbundpartner teilgenommen haben. Das Einwerben von Studierenden als MSc/BSc Absolvent:innen im Rahmen von KURSIV wurde verstärkt vorangetrieben, blieb jedoch bisher ohne Erfolg.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Konkretisierung der Arbeiten zum SotA-Bericht in enger Zusammenarbeit mit allen Partnern.

AP2/3: Um das unterschiedliche Sorptionsverhalten von Albit zu ergründen, werden in erster Instanz BET-Analysen von Albit beim Projektpartner KIT durchgeführt, sowie verschiedener Feststoffproben vom HZDR bei der GRS.

Als weiterer Versuch zur Reduzierung der Al/Fe-Verunreinigung der Quarzproben werden mehrstufige Auslaugversuche in verdünnter Salpetersäure durchgeführt.

Es werden Al Batchsorptionsreihen mit Merck Quarz unter geochemischen Bedingungen komplementiert, bei denen Ausfällung von Al wahrscheinlich ist.

Als Alternative zu Al Batchsorptionsversuchen mit Quarz sind Säulenversuche geplant, um daraus Oberflächenkomplexparameter abzuleiten.

Es sind potentiometrische Titrations von Orthoklas und ggf. bereits Quarz mit und ohne Al-Oberflächenanfällungen geplant.

AP7: Abschluss des Lehrauftrags für das Sommersemester 2024 an der TU Clausthal.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe)		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E12052C</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (Teilprojekt KIT im Verbundvorhaben KuRSiv)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C1.3 Methodische Grundlagen eines Standortvergleichs		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2023 bis 30.06.2026	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 473.763,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Johannes Lützenkirchen	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt KuRSiv (Partner: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, und Institut für Ressourcenökologie (HZDR)) untersucht die Rückhaltung von Radionukliden (RN) an Mineralphasen in Gegenwart von Aluminium und anderen Metallkationen, die aus der Auflösung der Minerale entstehen. Der Schwerpunkt der experimentellen Arbeiten ist zum einen auf das Verständnis der Nukleation, dem ersten Schritt in der Bildung von Mineralphasen, gerichtet. Weiterhin soll die Sorption der RN z.B. aufgrund von Auflösung der Mineralphasen als kompetitiver Prozess mit Metallionen aus der Mineralauflösung oder generell dem Porenwasser beschrieben werden, die mit den RN um Sorptionsplätze konkurrieren. In Kombination soll KuRSiv die für eine realistische Beschreibung der RN-Rückhaltung in hochkomplexen Systemen notwendigen Modelle bereitstellen inklusive einer realistischen Parametrisierung. Dies soll die Vorhersagequalität und Praktikabilität entsprechender Modellierungen erhöhen und damit das Vertrauen der Öffentlichkeit, der wissenschaftlichen Gemeinschaft und der Aufsichtsbehörden in solche Vorhersagen stärken.

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP 1: State-of-the-Art: Bewertung
- AP 2: Kompetitive Effekte
- AP 3: Oberflächenausfällungen
- AP 4: Oberflächenpotential und –ladung (ohne direkte HZDR-Beteiligung)
- AP 5: Thermodynamische Daten & Modell
- AP 6: Proof-of-Concept
- AP 7: Koordination, Wissenstransfer

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Es wurden Versuche mit der QCM durchgeführt, die das Ziel hatten, Literaturdaten zu bestätigen. Die Literatur-Ergebnisse waren jedoch nur nach längeren Untersuchungen und Auswertungen mehr oder weniger reproduzierbar. Insbesondere wurde deutlich, dass die Autoren des Originalartikels ihre Roh-Daten behandelt haben müssen. Mit Verschieben/Angleichen von Hintergrundsignalen konnten aus den am INE durchgeführten Versuchsreihen vergleichbare Ergebnisse wie die bereits von anderen publizierten erhalten werden.

Es wurde überprüft, inwieweit es möglich ist, QCM Zellen gezielt mit Partikeln zu beschichten. Da im Zentrum des Projekts Feldspäte stehen, wurden in dieser Perspektive einige Versuche unternommen. Mehrere Optionen zum Beschichten von QCM Zellen mit Feldspat-Proben von HZDR waren nicht erfolgreich. Es wurde jedoch eine Quelle für „kommerzielle“ QCM-Feldspat-Zellen gefunden. Diese sind inzwischen bestellt.

Strömungspotentialmessungen mit runden und rechteckigen Proben des gleichen Materials wurden durchgeführt, um die Auswertung der Versuche mit den runden Proben zu überprüfen (es gibt keine Theorie für die runden Proben; daher ist nicht klar, wie die Auswertung in der Software gehandhabt wird; Rückfrage beim Hersteller des Strömungspotentialmessgeräts ergab, dass die Auswertung auf oberflächenäquivalenter Kanalfläche beruht). Eigene Messungen zeigten starke Zeitabhängigkeiten mit dem einzigen vorhandenen Material, das für die drei Kanalgeometrien verfügbar war (für 1 cm x 2 cm, 14 mm und 15 mm Durchmesser Proben). Daher wurden weitere Proben gesucht, mit denen diese Versuche wiederholt werden können. Es ist unumgänglich, die Auswertung mit den verschiedenen Geometrien zu verifizieren.

Zudem wurden die Entwicklung eines kombinierten Aufbaus vorangetrieben, die die Messung von Strömungspotential und mittels QCM an identischen Proben praktisch simultan ermöglicht. Die Zellen werden derzeit in Zusammenarbeit mit MicroVakuum produziert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2: Ladungs-Charakterisierung von Glimmern, Al-freien Feldspäten und Quarz.
- AP4: Weitere Tests der Zelle für Strömungspotentialmessungen an runden QCM-Proben mit neuem Material (Glas). Beschichtung der Glasproben mit Aluminiumoxid (voraussichtlich in Zusammenarbeit mit Uni Wien). Tests mit der Messzelle, mit der QCM und Strömungspotentialmessungen an identischen Proben möglich sind. Durchführung von Versuchen mit den Feldspat-beschichteten QCM-Proben.
- AP5: Weiter Literatur-Recherche zu aktuellen Arbeiten bzgl. Oberflächenausfällung.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

keine

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Technische Universität Darmstadt, Institut für Angewandte Geowissenschaften, Fachgebiet Ingenieurgeologie, Schnittspahnstraße 9, 64287 Darmstadt		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12062A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe), Teilprojekt A: Ungewissheiten in den Materialparametern, Rand- und initialen Spannungsbedingungen sowie Einfluss der Rechengitterauflösung		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C1.1 Geowissenschaftliche und geotechnische Methoden zur Standorterkundung (Feld und Labor)		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2023 bis 31.12.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 258.500,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Andreas Henk, TU Darmstadt	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Robuste Prognosen zum Spannungszustand in der Erdkruste sind zur Charakterisierung potenzieller Standorte für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle von zentraler Bedeutung. Zur Einschätzung des Vertrauensbereiches geomechanisch-numerischer Modelle ist auch eine Angabe der Ungewissheiten in den prognostizierten Spannungsmagnituden und -orientierungen erforderlich. Für alle Komponenten des Spannungstensors müssen daher Wertebereiche mit den entsprechenden Wahrscheinlichkeiten angegeben werden. Dies setzt eine systematische Quantifizierung der Ungewissheiten der in die Modellierung eingehenden Parameter wie Untergrundgeometrie, Materialkennwerte, Randbedingungen und der zur Kalibrierung verwandten Spannungsdaten voraus. Im Rahmen des SQuaRe-Projektes wird die Expertise der Verbundpartner in geomechanisch-numerischer Modellierung, Interpretation von Spannungsindikatoren und Angewandter Statistik kombiniert. Dies erlaubt eine umfassende quantitative Betrachtung der Ungewissheiten von Spannungsprognosen, die sowohl für eine Standortcharakterisierung als auch für einen Standortvergleich verwandt werden können. Während für die Entwicklung des Arbeitskonzeptes und der Modellierungswerkzeuge ein generisches Referenzmodell genutzt wird, erfolgt der Nachweis der allgemeinen Anwendbarkeit in einer Fallstudie an einem realen Datensatz aus der Nordschweiz.

Die Vorhabensbeschreibung bezieht sich auf das Projektförderprogramm des BMWi zur Sicherheitsforschung für kerntechnische Anlagen (2021-2025). Das Vorhaben ist im FuE-Gebiet C – Endlagerforschung bzw. insbesondere im FuE-Bereich C1 – Standortauswahl angesiedelt. Die Arbeiten sind im Wesentlichen dem FuE-Feld C1.1 Geowissenschaftliche und geotechnische Methoden zur Standorterkundung mit dem FuE-Thema Felsmechanik zuzuordnen. Aufgrund der ausgeprägten methodischen Aspekte des Vorgabens, die u.a. für einen Standortvergleich genutzt werden können, bestehen aber auch Beziehungen zu dem FuE-Feld C1.2 Charakterisierung des Geosystems und Geosynthese (FuE-Thema Weiterentwicklung der Verfahren zur Modellierung des Geosystems), zu dem FuE-Feld C1.3 Methodische Grundlagen eines Standortvergleichs (FuE-Thema Grundlagen für den Vergleich von Endlagersystemen) sowie zu dem FuE-Feld C3.2 Methodische Grundlagen der Nachweisführung (FuE Thema Methodik zum Umgang mit Ungewissheiten) des FuEBereiches C3 – Sicherheitsnachweis.

## **2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete**

Die Arbeiten sind auf fünf Arbeitspakete (AP) entsprechend der spezifischen Expertise der drei Projektpartner verteilt. Das Arbeitspaket AP1, an dem alle mitarbeiten, bildet den Rahmen der Arbeitspakete AP2-AP4, in denen jeweils Teilaspekte der Ungewissheiten eines geomechanisch-numerischen Modells betrachtet werden. AP1 dient zur Integration der verschiedenen Modellierungskonzepte zur Quantifizierung der gesamten Modellungsgewissheiten und zur Entwicklung von geeigneten Beprobungsstrategien zu deren Reduzierung. AP2 an der RWTH Aachen fokussiert auf die Ungewissheiten in den geologischen Strukturen, d.h. auf die Modellgeometrie. AP3 an der TU Darmstadt untersucht den Einfluss durch die räumliche Verteilung der Gesteinseigenschaften, die Rechengitterauflösung sowie die Initial- und Randbedingungen. AP4 am GFZ Potsdam konzentriert sich auf den Einfluss der Modellkalibrierungsdaten. In der finalen Projektphase erfolgt in AP5 eine Validierung des Modellierungskonzeptes und der entwickelten Modellierungswerkzeuge aus AP1-AP4 in Form einer Fallstudie an einem realen Datensatz und einem hoch aufgelösten Modell aus der Nordschweiz. An AP5 arbeiten ebenfalls alle Projektpartner gemeinsam.

## **3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse**

Trotzdem das Referenzmodell der NAGRA für den Standort Nördlich Lägern, das insbesondere in AP5 genutzt werden soll, zu Beginn des Jahres noch einmal verändert wurde, konnten diese Aktualisierungen bereits für die generischen Modellierungen übernommen werden. So ist gewährleistet, dass die Ergebnisse der Modellstudien in AP3 als auch die Fallstudie in AP5 konsistent und vergleichbar zu anderen Arbeiten sind, die die gleiche Modellgeometrie des Standortes nutzen. Im Fokus der Arbeiten im ersten Halbjahr 2024 standen zahlreiche generische Modellserien, mit denen der Einfluss unterschiedlicher Rechengitterauflösungen (Elementgröße), verschiedener Elementtypen sowie von Elementen verschiedener Ordnung (lineare vs. quadratische Ansatzfunktionen) auf die Modellergebnisse untersucht wurde. Zur Untersuchung des Einflusses der mechanischen Kennwerte wie E-Modul und Poissonzahl auf die berechneten Spannungsmagnituden wurden Bohrungsdaten aus der Nordschweiz herangezogen. Hier liegen sowohl zahlreiche in situ Spannungsmessungen als auch umfangreiche felsmechanische Untersuchungen an Kernmaterial vor. Um die Auswirkung der Ungewissheiten in den Materialparametern auf die Modellierungsergebnisse zu quantifizieren, wurde ein neuer Ansatz entwickelt und getestet. Dazu wurden aus dem möglichen Spektrum Materialparameter an statistisch vordefinierten Punkten (Quantile und Perzentile) gewählt. Auf deren Basis wurde eine überschaubare und im zeitlichen Rahmen vertretbare Anzahl an numerischen Simulationen gerechnet, um mittels relativ weniger Modellrechnungen den Parameterraum zu testen. Die aus der Unsicherheit der Materialparameter resultierende Unsicherheit der Spannungsmagnituden konnte gut die Abweichungen der Spannungsmessungen für die getesteten Standorte erklären.

## **4. Geplante Weiterarbeiten**

Im zweiten Halbjahr 2024 soll die Auswertung der verschiedenen generischen Modellserien abgeschlossen werden. Ein weiterer Fokus liegt auf den Arbeiten, die sich mit der Skalierung der Materialparameter in Abhängigkeit vom Betrachtungsmaßstab beschäftigen. Darüber hinaus sollen die aktuellen Ergebnisse für Publikationen aufbereitet werden.

## **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Erste Projektergebnisse wurden auf der Konferenz der European Geoscience Union (EGU) in Wien und auf der Konferenz 'Tectonic Stress: From the lithosphere to the wellbore' der Geological Society in London vorgestellt. Im Juni 2024 fand ein zweitägiges Arbeitstreffen des Projektes SQuaRe in Potsdam statt, bei dem auch eine gemeinsame Publikation aller Projektpartner vorbereitet wurde.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Helmholtz Zentrum Potsdam Deutsches GeoForschungsZentrum GFZ, Telegrafenberg, 14473 Potsdam		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12062B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Spannungsprognosen - Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe). Teilprojekt B: Bayesischer Ansatz zur Kalibrierung geomechanisch-numerischer Modelle mit Reduzierung der Ungewissheiten		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C1.1 Geowissenschaftliche und geotechnische Methoden zur Standorterkundung (Feld und Labor) C1.2 Charakterisierung des Geosystems und Geosynthese		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2023 bis 31.12.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 366.885,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Oliver Heidbach	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Robuste Prognosen zum Spannungszustand in der Erdkruste sind zur Charakterisierung potenzieller Standorte für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle von zentraler Bedeutung. Zur Einschätzung des Vertrauensbereiches geomechanisch-numerischer Modelle ist auch eine Angabe der Ungewissheiten in den prognostizierten Spannungsmagnituden und -orientierungen erforderlich. Für alle Komponenten des Spannungstensors müssen daher Wertebereiche mit den entsprechenden Wahrscheinlichkeiten angegeben werden. Dies setzt eine systematische Quantifizierung der Ungewissheiten der in die Modellierung eingehenden Parameter wie Untergrundgeometrie, Materialkennwerte, Randbedingungen und der zur Kalibrierung verwandten Spannungsdaten voraus. Im Rahmen des SQuaRe-Projektes wird die Expertise der Verbundpartner in geomechanisch-numerischer Modellierung, Interpretation von Spannungsindikatoren und Angewandter Statistik kombiniert. Dies erlaubt eine umfassende quantitative Betrachtung der Ungewissheiten von Spannungsprognosen, die sowohl für eine Standortcharakterisierung als auch für einen Standortvergleich verwandt werden können. Während für die Entwicklung des Arbeitskonzeptes und der Modellierungswerkzeuge ein generisches Referenzmodell genutzt wird, erfolgt der Nachweis der allgemeinen Anwendbarkeit in einer Fallstudie an einem realen Datensatz aus der Nordschweiz.

Die Vorhabensbeschreibung bezieht sich auf das Projektförderprogramm des BMWi zur Sicherheitsforschung für kerntechnische Anlagen (2021-2025). Das Vorhaben ist im FuE-Gebiet C – Endlagerforschung bzw. insbesondere im FuE-Bereich C1 – Standortauswahl angesiedelt. Die Arbeiten sind im Wesentlichen dem FuE-Feld C1.1 Geowissenschaftliche und geotechnische Methoden zur Standorterkundung mit dem FuE-Thema Felsmechanik zuzuordnen. Aufgrund der ausgeprägten methodischen Aspekte des Vorhabens, die u.a. für einen Standortvergleich genutzt werden können, bestehen aber auch Beziehungen zu dem FuE-Feld C1.2 Charakterisierung des Geosystems und Geosynthese (FuE-Thema Weiterentwicklung der Verfahren zur Modellierung des Geosystems), zu dem FuE-Feld C1.3 Methodische Grundlagen eines Standortvergleichs (FuE-Thema Grundlagen für den Vergleich von Endlagersystemen) sowie zu dem FuE-Feld C3.2 Methodische Grundlagen der Nachweisführung (FuE Thema Methodik zum Umgang mit Ungewissheiten) des FuE Bereiches C3 – Sicherheitsnachweis.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Die Arbeiten sind auf fünf Arbeitspakete (AP) entsprechend der spezifischen Expertise der drei Projektpartner verteilt. Das Arbeitspaket AP1, an dem alle mitarbeiten, bildet den Rahmen der Arbeitspakete AP2-AP4, in denen jeweils Teilaspekte der Ungewissheiten eines geomechanisch-numerischen Modells betrachtet werden. AP1 dient zur Integration der verschiedenen Modellierungskonzepte zur Quantifizierung der gesamten Modellungsgewissheiten und zur Entwicklung von geeigneten Beprobungsstrategien zu deren Reduzierung. AP2 an der RWTH Aachen fokussiert auf die Ungewissheiten in den geologischen Strukturen, d.h. auf die Modellgeometrie. AP3 an der TU Darmstadt untersucht den Einfluss durch die räumliche Verteilung der Gesteinseigenschaften, die Rechengitterauflösung sowie die Initial- und Randbedingungen. AP4 am GFZ Potsdam konzentriert sich auf den Einfluss der Modellkalibrierungsdaten. In der finalen Projektphase erfolgt in AP5 eine Validierung des Modellierungskonzeptes und der entwickelten Modellierungswerkzeuge aus AP1-AP4 in Form einer Fallstudie an einem realen Datensatz und einem hoch aufgelösten Modell aus der Nordschweiz. An AP5 arbeiten ebenfalls alle Projektpartner gemeinsam.

## 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Leider war auch die zweite Ausschreibung nicht erfolgreich, so dass wir erst im November 2023 nach erneuter Ausschreibung der Doktorandenstelle einen Kandidaten gewinnen konnten. Da der Kandidat noch seine Masterarbeit an der RWTH Aachen abschließen musste, konnte er die Stelle erst zum 15. Jan. 2024 antreten.

Im Rahmen eines zweiten Square Workshops Anfang Dezember an der TU Darmstadt haben wir gemeinsam mit den anderen Arbeitsgruppen den Aufbau des generischen Referenzmodells für AP1 sowie das Rechengitter, also die Diskretisierung in Finite Elemente, erweitert nachdem die ersten Tests mit dem einfachen initialen generischen Modell sehr erfolgreich verliefen. Dieses aktualisierte generische Modell ist die Grundlage für die Entwicklung und Validierung von Methoden, die in den jeweiligen APs der Teilprojekte bearbeitet werden. Daten und Geometrie sind eine vereinfachte Abstraktion des geomechanisch-numerischen Standortmodells Nördlich Lägern der NAGRA, das am Ende des Projektes als Case Study verwendet werden wird. Mit der Nutzung der Daten und Geometrie des Modells wird sichergestellt, dass die Dimensionen und Parameterräume de facto einem realen Setting entsprechen.

Die ersten Modellierungsergebnisse zeigen das grundsätzliche Potential der Reduced Basis Methode, da hiermit eine Beschleunigung der Rechenzeit um 4-6 Größenordnungen erzielt werden konnte ohne signifikanten Verlust an Präzision und Genauigkeit der Modellergebnisse. Mit dem aus der Reduced Basis Methode resultierenden Ersatzmodell können eine hohe Anzahl von Simulationen durchgeführt werden mit denen der gesamte Parameterraum statistisch gescannt werden kann, um die der Ungewissheiten des Modells in den Materialeigenschaften und Randbedingungen für die Spannungsprognose zu quantifizieren.

## 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Ergebnisse der ersten Studie waren auf technischer Seite so gut, dass wir gerade an einer ersten Publikation in einem internationalen peer-reviewed Journal arbeiten. Es wird soweit wir wissen die erste Anwendung des Reduced Basis Ansatzes in einem Modell mit einer Tensor-Größe sein. Ein weiterer Fokus im zweiten Halbjahr wird nach der Einarbeitung des Doktoranden sein die grundlegende Abschätzung wie die Ungewissheiten in den Modellkalibrierungsdaten (Daten zu den Magnituden der kleinsten und größten Horizontalspannung) in die Ungewissheiten der Modellprognose beitragen zu quantifizieren. Wir wollen ebenfalls untersuchen wie und ob indirekte Spannungsdaten mit in die Modellkalibrierung einfließen können. Dabei wollen wir untersuchen, ob eine Kalibrierung an Punktdaten zielführend ist, oder ob nicht die Wahrscheinlichkeitsverteilung im Lösungsraum unter Berücksichtigung von weiteren indirekten Spannungsinformationen eine robustere und effizientere Methode ist.

## 5. Berichte, Veröffentlichungen

Bisher liegen noch keine Berichte oder Veröffentlichungen vor.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> RWTH Aachen University		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12062C</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanischnumerischen Untergrundmodellen (SQuaRe) – Teilprojekt C		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C1.1 Geowissenschaftliche und geotechnische Methoden zur Standorterkundung (Feld und Labor) C1.2 Charakterisierung des Geosystems und Geosynthese		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.12.2022 bis 30.11.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 244.990,24 EUR	<b>Projektleiter:</b> Jan Florian Wellmann	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Robuste Prognosen zum Spannungszustand in der Erdkruste sind zur Charakterisierung potentieller Standorte für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle von zentraler Bedeutung. Zur Einschätzung des Vertrauensbereiches geomechanisch-numerischer Modelle ist auch eine Angabe der Ungewissheiten in den prognostizierten Spannungsmagnituden und -orientierungen erforderlich. Für alle Komponenten des Spannungstensors müssen daher Wertebereiche mit den entsprechenden Wahrscheinlichkeiten angegeben werden. Dies setzt eine systematische Quantifizierung der Ungewissheiten der in die Modellierung eingehenden Parameter wie Untergrundgeometrie, Materialkennwerte, Randbedingungen und der zur Kalibrierung verwandten Spannungsdaten voraus. Im Rahmen des SQuaRe-Projektes wird die Expertise der Verbundpartner von TU Darmstadt, GFZ Potsdam und RWTH Aachen in geomechanischnumerischer Modellierung, Interpretation von Spannungsindikatoren und Angewandter Statistik kombiniert. Dies erlaubt eine umfassende quantitative Betrachtung der Ungewissheiten von Spannungsprognosen, die sowohl für eine Standortcharakterisierung als auch für einen Standortvergleich verwandt werden können. Während für die Entwicklung des Arbeitskonzeptes und der Modellierungswerkzeuge ein generisches Referenzmodell genutzt wird, erfolgt der Nachweis der allgemeinen Anwendbarkeit in einer Fallstudie an einem realen Datensatz aus der Nordschweiz.

Die Arbeiten an der RWTH Aachen zielen insbesondere auf die Untersuchung des Einflusses von geometrischen Parametern und der Erstellung von Ersatzmodellen mittels Methoden der künstlichen Intelligenz. Darüber hinaus wird gemeinsam mit den anderen Verbundpartnern das generische Referenzmodell und die Fallstudie aus der Nordschweiz bearbeitet.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Die RWTH Aachen arbeitet gemeinsam mit den Verbundpartner in AP 1 zur Definition eines generischen Referenzmodells, das als integrierte Modellierungs- und Simulationsplattform für alle Arbeitsgruppen fungiert, ferner in AP 5 an der Validierung des Modellierungskonzeptes und der entwickelten Modellierungswerkzeuge anhand eines realen Datensatzes aus der Nordschweiz. Der Schwerpunkt der

Arbeiten liegt in AP 2 mit der systematischen Betrachtung von geometrischen Parametern auf die Ungewissheiten einer Spannungsprognose. Unter Verwendung des open-source Softwarepaketes GemPy werden einfache geologische Modelle erstellt und mit Hilfe weiterer open-source Pakete diskretisiert um dann für Spannungsprognosen verwendet werden zu können. Es wird untersucht welche Art von geometrischen Ungewissheiten den größten Einfluss auf die Spannungsprognosen

hat. Desweiteren werden Ersatzmodelle mit Hilfe eines physikbasierten maschinellen Lernansatzes erstellt, um die Berechnung der Ungewissheiten der Spannungsprognosen zu ermöglichen. Dieser Schritt ist notwendig, da

die einzelnen Simulationen eine zu lange Laufzeit haben um eine Ungewissheitsanalyse durchzuführen. In diesem Schritt liegt der Hauptfokus auf der Anwendung und Entwicklung von Methoden, die die physikalischen Eigenschaften der Modelle erhalten.

### **3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse**

Im Projekt sind die bereits implementierten und getesteten Ersatzmodelle für Spannungsprognosen auf eine vereinfachte Fallstudie, angelehnt an den Standort Nördlich Lägern, erweitert wurden. Für diesen Standort sind globale Sensitivitätsstudien durchgeführt wurden. Diese zeigen einen signifikanten Zusammenhang zwischen der möglichen Variabilität des E-Modulus und der Sensitivität. Dadurch zeigt sich sowohl der Einfluss von Unsicherheiten in den Gesteinseigenschaften auf weitere Analysen, aber auch die Notwendigkeit diese möglichst genau zu bestimmen und zu reduzieren. Die durchgeführten Arbeiten wurden in einem Artikelentwurf zusammengefasst und werden in Kürze in einem Journal eingereicht zwecks Veröffentlichung.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Während der globalen Sensitivitätsstudien hat sich gezeigt, dass die Ergebnisse wesentlich durch das Kostenfunktional der Analyse beeinflusst werden. Dieses Kostenfunktional bestimmt im Hinblick auf welchen Aspekt die Sensitivität bestimmt werden. Um die Anwendung von globalen Sensitivitätsstudien im Endlagerbereich zu ermöglichen, werden in den nächsten Schritt werden anwendungsspezifische Kostenfunktionale entwickelt. Desweiteren soll die Einbindung der jetzigen und zukünftigen Ersatzmodelle in probabilistische Unsicherheitsanalysen erfolgen. Zudem soll der bisherige Erkenntnisgewinn genutzt werden, um ein generelles Vorgehen für die Fallstudie in der Schweiz zu entwickeln. Dies dient zur Quantifizierung von Unsicherheiten und besseren Vorhersagen der Spannungszustände im Endlagerbereich.

### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Im Zuge des Projektes sind bisher noch keine Veröffentlichungen entstanden.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12072A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> MgO-Beton C3 als langzeitbeständiges und schnellwirksames Verschlusselement für Schachtverschlüsse zukünftiger HAW-Endlager im Salinar (MgO-C3), Teilprojekt A	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.12.2022 bis 30.11.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 694.407,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Daniela Freyer

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen des Sicherheitsnachweises zur Integrität eines HAW-Endlagers wird für die rechen-technische Bewertung eines potentiellen Lösungszutritts und der damit potentiell verbundenen Freisetzung von Radionukliden über die verschlossenen Schächte bisher immer nur der Einbauzustand der geotechnischen Barriere mit einer integralen Permeabilität von  $> 10^{-17} \text{ m}^2$  betrachtet. Dieser hohe Wert ergibt sich im Salinar vor allem über die immer vorhandene Auflockerungszone, die sich infolge des Aufkriechens des Salzgebirges nur langsam schließt. Von einer schnellen und auch gleichzeitig langanhaltenden Permeabilitätsverringern, bewirkt durch Schachtverschlusselemente, wie mit dem Einbau einer entsprechenden MgO-Baustoffrezeptur (effektive Abdichtung der ALZ über die schnelle und langanhaltende Expansionsdruckentwicklung des Baustoffs), wird bei der Nachweis-führung bisher kein Kredit genommen. Dass dieses Potential mit der MgO-Betonrezeptur C3 (3-1-8-Rezepturtyp) besteht, zeigen die Ergebnisse des abgeschlossenen FuE-Projektes ELSA II anhand von zwei in-situ-Großbohrlochversuchen. Zum bisher erreichten Kenntnis-stand sind offene Fragestellungen und damit Vorhabensziele die

- Verifizierung des langanhaltenden Kontaktdruckes und der damit verbundenen Permeabilitätsabnahme für das Gesamtsystem, d.h. Fortsetzung des in-situ-Großbohrlochversuch-Monitorings in der Grube Teutschenthal;
- Verständnisentwicklung zur vermuteten Wirkung des Zuschlaganteils Hartgestein auf Expansionsdruckentwicklung/-verbleib und Relaxationsverhalten des C3-Betons gegenüber anderen 3-1-8-Rezepturtypen (A1, DBM2, C3-Zement); dabei Substitution der Rezepturkomponente Quarzmehl unter Erhalt des langzeitlichen Kontaktdruckverhaltens;
- Ermittlung einer geomechanischen Datenbasis, u.a. Festigkeits- und Permeabilitätsverhalten sowie Kompaktionseigenschaften für die Prognose der Langzeitwirkung des C3-Beton-Dichtelements.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1: Weiterer Verlauf der Kontaktdruckentwicklung

AP2: Untersuchung der Schwankungsbreite der C3-Rezeptur

AP3: Neuformulierung der Rezeptur

AP4: Berichtserstellung

Die Arbeitspakete 2, 3 und 4 werden gemeinschaftlich unter Beteiligung des Verbund-partners HZDR bearbeitet.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Das Monitoring des in-situ-Großbohrlochversuchs (MgO-Beton C3) in der Grube Teutschenthal wurde fortgesetzt (alle Spannungen, Temperatur, Standortfeuchte). Nach inzwischen mehr als 5 Jahren (ca. 1900 Tage) verändern sich die radialen Kontaktdrücke nur noch sehr wenig (4,0 – 4,5 MPa). Der Versuchsstand ist für die geplante Lösungsdruckbeaufschlagung vor Ort installiert und erstgeprüft.

AP2: Mit der Notwendigkeit der Probekörper-Neuherstellung wurde das Laborzellen-Monitoringprogramm (Start 2023) auch für das TZF70 beendet. Aus den 36 Probe- und Druckmesszellen wurden nach deren Rücktransport nach Leipzig alle Probekörper ausgepresst, die Zellen aufgearbeitet und für die Neubefüllung vorbereitet. An den ausgepressten, sog. „Abbruchproben“, wurden die Rohdichten und an ausgewählten Probekörpern mechanische Indexversuche durchgeführt sowie das Gefüge mittels CT untersucht. Dabei zeigte sich ein systematisch höherer Luftporenanteil für die RV4 mit höchstem Kiesanteil hin zu RV1 mit niedrigstem Kiesanteil.

Die Probekörper-Neuherstellung erfolgte nun mit einer handelsüblichen Anmischlösung (im Labor hergestellt entspr. DEUSA S30<sub>ES</sub>). An zwei Anmischterminen (für TZF40 bzw. TZF70) wurden alle Probe- und Messzellen mit den vier Rezepturvarianten RV1 bis RV4 befüllt und das Monitoringprogramm (Druck, Phasenbestand, Temperatur) gestartet. Die bisherigen Messdaten zeigen die erwartete Phasenbestands- und damit verbundene Druckentwicklung. An zwei weiteren Terminen wurden kiesfreie Proben zur Quantifizierung der Bindemittelphasenbestandsentwicklung hergestellt und in entsprechenden Probezellen den beiden TZF ausgesetzt.

AP3: In der MgO-C3-Betonrezeptur konnte das Quarzmehl mit feingemahlenem, natürlichem Anhydrit unter Erhalt der Suspensionsstabilität substituiert werden. Zur Herstellung der Proben (in der RV3-Variante) wurde bereits eine entsprechende Anmischlösung (s. AP2) verwendet. Das Labor-Monitoring-Programm für TZF40 und TZF70 wurde gestartet. Es bildet sich mit den bisherigen Messdaten die erwartete Phasenbestands- und damit Druckentwicklung ab.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Fortsetzung des in-situ-Großbohrlochversuch-Monitorings (alle Spannungen, Temperatur, Standortfeuchte).

Beauftragung des Feuchtemonitoring durch die im Großbohrlochversuch mit eingebauten TDR-Kabelsensoren (ELSA II) durch ISU Karlsruhe und Beginn der Lösungsdruckbeaufschlagung.

AP2: Fortsetzung Labor-Monitoring-Programm (Druck, Phasenbestand, Temperatur) sowie Quantifizierung des Bindemittelphasenbestandes im jeweiligen TZF

AP3: Fortsetzung Labor-Monitoring-Programm (Druck, Phasenbestand, Temperatur).

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- keine

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12072B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: MgO-Beton C3 als langzeitbeständiges und schnellwirksames Verschluss- element für Schachtverschlüsse zukünftiger HAW-Endlager im Salinar (NgO-C3), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.12.2022 bis 30.11.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 36.856,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Johannes Kulenkampff	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Als eines von möglichen Schachtverschlusselementen in Salzformationen eignet sich der MgO-Baustoff der Rezeptur C3 besonders, weil abhängig von der Rezepturvariante eine sofortige Permeabilitätsabnahme des Gesamtsystems über den Aufbau eines schnell wirksamen und langanhaltenden Kontaktdruckes erreicht werden kann. Untersuchungen zur MgO-Betonrezeptur C3 mit Fortsetzung des bestehenden untertägigen in-situ-Monitorings zusammen mit einem komplexen Untersuchungsprogramm zum Nachweis sowie der Verständniserwicklung zur Aufrechterhaltung des langanhaltenden Kontaktdruckes in Abhängigkeit von den Rezepturkomponenten und deren möglicher Schwankungsbreite ist Gegenstand dieses Verbundvorhabens.

Das Teilprojekt des HZDR soll das Gefüge des Zuschlagskorngerüsts analysieren und zur Klärung seines Einflusses auf die Kontaktdruckentwicklung dienen.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Hauptvorhaben:

- AP1: Kontaktdruckentwicklung.
- AP2: Schwankungsbreite der C3-Rezeptur.
- AP3: Neuformulierung der Rezeptur.
- AP4: Berichtserstellung.

Im Teilprojekt des HZDR werden im Rahmen der AP 2 und 3 tomographische Aufnahmen von Prüfkörpern erstellt und bezüglich ihres Gefüges analysiert, insbesondere in Hinblick auf das Kontaktverhalten des Korngerüsts.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2.5  $\mu$ CT-Aufnahmen von Proben mit Rezepturvariante 1 und 4.

Quantitative 3D-Bildanalyse.

Algorithmusentwicklung zur Unterscheidung von Luftporen und Gefügeporosität anhand der Ergebnisse der Bildanalyse, sowie zur Abschätzung des Abstandes isolierter Luftporen.

Die Rezepturvarianten zeigen erhebliche Unterschiede der räumlichen Verteilung der Porenart (kugelförmige Luftporen und eher flächig ausgebreitete Gefügaporen) und der Porengrößenverteilungen. Ein Zusammenhang mit den mechanischen Eigenschaften ist zu vermuten. Dagegen wurden bisher keine signifikanten Einflüsse der Rezepturvarianten auf das Korngerüst gefunden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP2.5  $\mu$ CT-Untersuchungen an weiteren MgO-C3-Proben, Probenübernahme ist im Juni 2024 erfolgt.

Parametrisierung der Eigenschaften des Porengefüges für den direkten Vergleich mit mechanischen Eigenschaften in Zusammenarbeit mit den Projektpartnern.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

keine

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> TU Clausthal - Lehrstuhl für Geomechanik und multiphysikalische Systeme		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12082</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken - Durchführung, Auswertung und Reanalyse von THM-Versuchen unter triaxialer Extensionsbeanspruchung (SSBVIER)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2023 bis 31.12.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 243.874,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> apl. Prof. Dr.-Ing. habil. Uwe Düsterloh	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Durchführung, Auswertung und numerisch-rechnerische Reanalyse von Technikums-versuchen an Großprüfkörpern aus Salzschnittblöcken mit und ohne Fugenfüllung zur Untersuchung der Dicht- und Tragwirkung des Systems unter in situ relevanten THM-Belastungen. Bezug zu anderen Vorhaben: Für die Reanalyse von Abdichtungssystemen aus Salzschnittblöcken mit Fugenfüllung aus Salzgrus werden die im Rahmen des Forschungsvorhabens KOMPASS (02E11708D und 02E11951D) erarbeiteten Ergebnisse zur stoffmodelltheoretischen Charakterisierung von Salzgrus integriert.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP 1 Beschaffung von gewachsenem Steinsalz.
- AP 2 Herstellung von Salzschnittblöcken.
- AP 3 Durchführung und Auswertung von Technikumsversuchen unter variierten THM-Beanspruchungen.
- AP 4 Rechnerische Reanalyse der Technikumsversuche mit Verifikation, Validation und Er-tüchtigung / Erweiterung der Berechnungssoftware.
- AP 5 Erstellung Schlussbericht.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: -

AP2: Herstellung der Salzschnittblöcke für einen vierten Prüfkörper (Durchmesser = 0,55 m und Höhe = 1,5 m) mit einer Fugenbreite von 0,1 mm (ohne Salzgrusfugenfüllung)

AP3: Fortführung des dritten Prüfkörpertests mit Salzschnittblock-Konfiguration mit einer Fugenbreite von 5 mm und Salzgrusfugenfüllung: Analyse der Permeabilität für variierte mechanische und hydraulische Beanspruchungen.  
Herstellung Prüfkörper vier mit Salzbetonschalung

AP4: -

AP5: -

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1:

AP2: Weitere Herstellung von Salzschnittblöcken für den vierten Prüfkörper (Durchmesser = 0,55 m und Höhe = 1,5 m) mit einer Fugenbreite von 0,1 mm (ohne Salzgrusfugenfüllung);  
Finalisierung Prüfkörper

AP3: Fortsetzung des dritten Prüfkörpertests (Salzschnittblock-Konfiguration mit einer Fugenfüllung)

AP4: Aufbau und Versuchsbeginn Versuch 4 (mit Salzbetonschalung)

AP5: Erstellung Schlussbericht

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Düsterloh, U.; Lerche, S.; Zhao, J. (2023): Pilot plant tests to demonstrate the functionality of sealing elements made of salt cut bricks, Poster Projektstatusgespräch 2023, Karlsruhe, 06.11.2023 – 07.11.2023.

Düsterloh, U.; Lerche, S.; Zhao, J. (2024): Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken - Durchführung, Auswertung und Reanalyse von THM-Technikumsversuchen, 4. Tage der Standortauswahl, Goslar, 18./19. April 2024.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Leibniz Universität Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12092</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Recherche und Beschreibung für das Endlagerbehältersystem in Frage kommende Materialien (ElaBeMa)			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2023 bis 30.06.2024		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 109.102,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr.-Ing. Thomas Hassel	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Im fortschreitenden Standortauswahlverfahren stellen sich vermehrt Fragen nach der technischen Barriere zur Beschreibung und Entwicklung des Entsorgungspfades. Viele dieser Fragen sind bisher nicht beantwortbar, da die für die Antworten notwendigen Ausgangsbedingungen, noch nicht definierbar sind.

Ziel ist es, für das Gesamtsystem Endlagerbehälter wirtsgesteinsübergreifend zu recherchieren, welche Materialien in Bezug auf die an die Behälter zu stellenden Anforderungen in Frage kommen können und die Recherche auf die derzeitigen ingenieurtechnischen Werkstoffentwicklungen zu erweitern. Projektziel ist eine umfassende Abhandlung als Überblick über die An- und Verwendung von Materialien im Bereich der Verwendung im Endlagerbehältersystem. Es erfolgt eine Erarbeitung einer klaren Informationsstruktur zur strukturierten Darstellung der Vor- und Nachteile betrachteter Materialien. Fokus der Arbeiten liegt dabei auf der Forderung Informationen zu Behältermaterialien zu erarbeiten, welche möglichst das Endlagerbehältersystem für alle Wirtsgesteinsarten qualifizieren und einen starken Bezug zu Fragen der Verfügbarkeit und Herstellbarkeit, also der Produktionstechnik, tragen.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

### 1. Literaturrecherche und Auswertung zu Behältermaterialien

#### 1.1. Recherche Werkstoffsysteme

Dabei wird systematisch der Ansatz zugrunde gelegt, dass die Materialien sowohl eine konstruktive, als auch eine Barrierefunktion haben sollten. Damit werden hier Informationen zusammengetragen, welche sich nicht nur auf das dickwandige Behältermaterial beschränken, sondern sowohl im Behälterinneren, als auch als Behälterbeschichtungsmaterial außen eine Einsatzperspektive bieten können.

#### 1.2. Recherche Produktionstechnik

Im Weiteren Arbeitsablauf werden die recherchierten Werkstoffsysteme in Bezug zur Produktionstechnik gesetzt und es wird ermittelt ob und in welcher Form die Verfügbarkeit und die Herstellbarkeit zur Anwendung im Endlagergebäude gegeben ist.

#### 1.3. Recherche Einflussparameter

Die Recherche wird um die Einflussparameter erweitert, damit die Erfolgsperspektiven der Materialentscheidungen und Materialverortungen abgeschätzt werden können.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im letzten Berichtszeitraum wurden grundlegende Anforderungen an das Behältermaterial aus gesetzlichen Vorgaben sowie Studien zu Endlagerbehältern, Geologie der in Frage kommenden Wirtsgesteine und Berichten zum End- und Zwischenlagerbau erarbeitet, sowie eine strukturierte Literatursammlung aufgebaut.

Die erarbeiteten Anforderungen und Randbedingungen an den Endlagerbehälter wurden methodisch bezüglich des Behältermaterials weiter spezifiziert. Sie wurden hierzu nach Anforderungen und Randbedingungen kategorisiert sowie ihren Funktionsorten zugeordnet. Nach dieser ersten Untersuchung konnten bestimmte Werkstoffgruppen (wie z.B. Polymere) ausgeschlossen werden und werden daher nicht weiter betrachtet.

Anhand der erarbeiteten Anforderungen, wurden die in Frage kommenden Werkstoffe näher beschrieben und ihre Eignung anhand der Anforderungen untersucht, sowie die Bewertung bzw. die Verwendung der Werkstoffgruppen im internationalen Kontext der Endlagerung betrachtet. Zudem wurden die Werkstoffe hier auch bezüglich ihres Verhaltens unter den weiteren Einflussparametern aus Arbeitspaket 1.3 beschrieben.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Zunächst sollen Fertigungsmethoden beschrieben und deren Eignung für die in Arbeitspaket 1.1 beschriebenen Werkstoffe erörtert werden.

Bei der Betrachtung dieser möglichen Produktionstechniken (Arbeitspaket 1.2) soll nicht nur ihre Eignung für bestimmte Werkstoffe untersucht werden, sondern auch die Einflüsse der Fertigungstechnik auf den Werkstoff und die daraus resultierenden veränderten Werkstoffeigenschaften, sowie deren Auswirkungen auf die Eignung für einen Endlagerbehälter. Zudem muss die Fertigungstechnik für den Verschluss des Behälters automatisiert ablaufen können, um das hochradioaktive Inventar sicher einschließen und Personal vor der ionisierenden Strahlung schützen zu können.

Bei der Beschreibung der Verfahren zur Herstellung soll zudem darauf geachtet werden, dass nicht nur singuläre Werkstoffe, sondern auch Werkstoffsysteme ein besonderes Potential bieten können.

Am Ende dieses Prozesses soll eine Werkstoffauswahl stehen, die Anforderungen und Randbedingungen erfüllt. Dies bedeutet, dass das oder die ausgewählten

Werkstoffe/Werkstoffsysteme die Schutzfunktion des Endlagerbehälters sicherstellen und es möglich ist diesen nach heutigem Stand der Technik zu fertigen.

Bis zum 31.12.2024 wird der Bericht fertiggestellt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Hassel, T. (2023): Concretisation of host-rock-dependent canister concepts through the development of a consistent but variable multi-barrier system for the future engineered barrier system, *Saf. Nucl. Waste Disposal*, 2, 43–44, <https://doi.org/10.5194/sand-2-43-2023>

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> TU Braunschweig, Postfach 3329, 38023 Braunschweig		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12102</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Entwicklung einer selbstlernenden Modellierungsmethodik zu geomechanischen und geotechnischen Prozessen am Beispiel der Planungs- und Auffahrungsphase einer Einlagerungsstrecke eines Tiefenlagers (SEMOTI)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3.3. Werkzeuge der Sicherheitsanalysen		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2023 bis 30.04.2026	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 999.050,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Univ.-Prof. Dr.-Ing. J. Stahlmann	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Die Projektpartner haben das Gesamtziel, eine auf dem maschinellen Lernen basierende Modellierungsmethodik für Tiefenlagersysteme zu entwickeln, mit der anhand eines Demonstrators „Einlagerungsstrecke mit Versatz und Verschlussbauwerk im Steinsalz“ ein Optimierungsprozess während der Planungsphase und ein Kalibrierungsprozess während der Auffahrungsphase im Bereich der geomechanischen und geotechnischen Fragestellungen ermöglicht wird.

Innerhalb des Optimierungsprozesses gilt es zunächst für den virtuellen Demonstrator (numerisches Modell) das bestmögliche Verschlussbauwerk unter Berücksichtigung der Streubreiten der Gebirgskennwerte und Materialeigenschaften sowie der Geometrie des Verschlussbauwerkes zu finden. Der Optimierungsprozess wird anhand des hydraulischen Widerstandes als Zielfunktion ausgewertet und hat die automatisierte Generierung eines optimalen Entwurfes einer Einlagerungsstrecke eines Tiefenlagers zum Ziel.

In der zweiten Projektphase wird die Auffahrungsphase betrachtet, in welcher der virtuelle Demonstrator mit Monitoringdaten mittels Modellkalibrierung zu einem Digital Twin eines Tiefenlagers erweitert wird. Da während des Optimierungs- und Kalibrierungsprozesses eine Vielzahl an numerischen Simulationen durchgeführt werden müssen, wird der virtuelle Demonstrator durch ein selbstlernendes Metamodell mittels Gaußprozessen repräsentiert.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Vorhaben besteht aus folgenden Arbeitspaketen. Die Grundlagen in Form einer Datenbank und eines parametrisierten virtuellen Demonstrators werden in AP 1-4 erstellt. Die Optimierungs- und Kalibrierungsprozesse werden in AP 5-7 untersucht.

AP1: Erstellen einer Datenbank zu Tiefenlagerkonzepten und Systemeigenschaften (IGG)

AP2: Erstellen eines virtuellen Demonstrators (IGG)

AP3: Parametrisierung des virtuellen Demonstrators (IGG)

AP4: Maschinelles Lernen mittels Gaußprozessen (IRMB, IDS)

AP5: Implementierung eines Optimierungsprozesses für die Planungsphase (IDS)

AP6: Implementierung eines Kalibrierungsprozesses für die Auffahrungsphase (IRMB)

AP7: Sensitivitätsbetrachtung (IGG, IRMB, IDS)

AP8: Administrative Arbeiten

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Nach den Vorarbeiten in AP1, AP2, AP3 und AP4 sowie dem erfolgreichen Testen der Kalibrierung ausgewählter Parameter des Stoffmodells *TUBSsalt* anhand von generischen Messdaten (AP 6) unter Anwendung einer globalen Sensitivitätsanalyse (AP 7), stehen nun saubere Monitoringdaten der BGE bestehend aus vertikalen und horizontalen Konvergenzmessungen einer Strecke im Salzstock Gorleben zur Verfügung. Für den Messquerschnitt wurde ein numerisches 2D-Modell erstellt, mit dem unter Variation 10 ausgewählter Parameter des Stoffmodells *TUBSsalt* 500 Trainings- und Validierungsdaten erzeugt wurden. Auf Grundlage dessen wurde innerhalb von 1,2 Minuten ein Ersatzmodell basierend auf Gaußprozessen erstellt, welches die Input-Output Beziehung zwischen Stoffmodellparametern und Streckenkonvergenzen mit einer hohen Genauigkeit gegenüber den Validierungsdatensätzen widerspiegelt. Die anschließende Sensitivitätsanalyse mittels Sobol Indizes, für deren Konvergenz  $2^{14} = 16.384$  Modellaufrufe nötig sind, konnte durch das Ersatzmodell innerhalb von 11,2 Minuten effizient durchgeführt werden und lieferte 4 einflussrelevante Parameter des primären und sekundären Kriechens ( $\eta_p$ ,  $E_p$ ,  $\eta_s$  und  $p_s$ ). Mit diesen wurden 100 neue Trainingsdaten sowie ein neues Ersatzmodell mit einer ebenfalls hohen Genauigkeit erstellt, welches abschließend in einer Optimierungsschleife durch 2720 Modellaufrufe innerhalb von 1 Sekunde anhand der Monitoringdaten kalibriert wurde. Die vorhergesagten Konvergenzen an 50 unabhängigen Zeitpunkten stimmen sehr gut mit den realen Messdaten überein. Ebenso weichen die Werte der kalibrierten Stoffmodellparameter nur leicht von manuell ermittelten Schätzungen ab, womit die Ergebnisse des automatisierten Kalibrierungsprozesses als valide betrachtet werden können (AP 6).

Weiterhin wurde für ein erstes Testszenario der Optimierungsphase unter Variation der Streckengeometrie automatisiert Trainingsdaten für die Entwicklung der Schädigung in der Auflockerungszone (ALZ) unter Berücksichtigung eines Verschlussbauwerkes aus MgO-Beton erzeugt (AP 5).

Erste Arbeiten des Forschungsvorhabens wurde bei den Tagen der Standortauswahl in Goslar vom 18.-19. April 2024 mithilfe eines Posters vorgestellt. Konkretere Ergebnisse zum Kalibrierungsprozess wurden im Rahmen des US/German Workshops in Manchester vom 25.-28. Juni 2024 präsentiert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Der Workflow und die aktuellen Ergebnisse des Kalibrierungsprozesses werden in einem Paper mit dem Namen „Gaussian Processes enabled model calibration in the context of deep geological disposal“ zusammengefasst und in naher Zukunft veröffentlicht werden.

In einem nächsten Schritt soll eine adaptive Sampling-Methode innerhalb der Schleife für die Erstellung der Trainingsdaten implementiert werden, um Stützstellen mit größtmöglichem Informationsgewinn zu identifizieren und die Generierung von Trainingsdaten für den Kalibrierungs- und Optimierungsprozess effizienter zu gestalten (AP5 & 6).

Der Arbeitsablauf zum Kalibrierungsprozess soll abschließend durch die Erweiterung zu einem zeitabhängigen GPs-basierten Ersatzmodell vervollständigt werden, welches eine Prognose einschließlich Unsicherheitsquantifizierung ermöglicht (AP6).

Auf Basis eines GPs-basierten Ersatzmodells soll nun für das Testszenario der Optimierungsphase die Anwendung einer automatisierten und zeiteffizienten Optimierungsschleife zur Minimierung der Schädigung/Permeabilität in der ALZ getestet werden (AP5).

Zukünftige Schritte beinhalten außerdem die Erhöhung der Modellkomplexität (AP6) und die Integration des digitalen Zwillings der betrachteten Strecke aus der Kalibrierungsphase in den Optimierungsprozess (AP 5). Um dabei Simulationen des komplexen 3D-Modells zur Erstellung von Trainings- und Validierungsdaten zeiteffizient durchführen zu können, soll High-Performance-Computing (HPC) eingesetzt werden (AP5 & 6).

## 5. Berichte, Veröffentlichungen

Paul, L.; Fiaz, U.; Stahlmann, J.: **SEMOTI - Entwicklung einer selbstlernenden Modellierungsmethodik für die Einlagerungsstrecke eines Tiefenlagers**. In: Röhlig, K.-J. (Hrsg.). 4. Tage der Standortauswahl 18./19.04.2024 in Goslar. <https://doi.org/10.21268/20240416-1>, S.126-127, Clausthal-Zellerfeld, 2024.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstrasse 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12112A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Systematic sensitivity analysis for mechanistic geochemical models using field data from crystalline rock (SANGUR), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.02.2023 bis 31.01.2026	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 975.750,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Vinzenz Brendler	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt SANGUR (Partner: TU Clausthal, Institut für Endlagerforschung (TUC), und ÚJV Řež, a. s. als Unterauftragnehmer des HZDR) zielt auf ein verbessertes Verständnis und die Einbeziehung von Parameterunsicherheiten im Kontext der nuklearen Entsorgung. Es ebnet den Weg, um denkbare und vertretbare Fehlermargen für alle wichtigen Zielfunktionen innerhalb von Langzeitsicherheitsbewertungen zukünftiger Endlagersysteme in tiefen geologischen Formationen, hier kristallinen Gesteinen, zu gewinnen. Das Projekt baut auf einem umfassenden State-of-the-Art-Bericht (SOTA) über die derzeitige Behandlung von Ungewissheiten durch Sensitivitätsanalysen in geologischen Systemen aus mathematischer Sicht auf, der auch fortgeschrittene Softwareimplementierungen umfasst. Ergänzt wird dies durch eine gründliche Analyse der reaktiven Transportprozesse in kristallinem Gestein und die Ableitung entsprechender Modelle. In einem nächsten Schritt werden diese Modelle unter Einbeziehung realistischer Unsicherheiten parametrisiert. Parallel dazu wird der SOTA-Bericht genutzt, um eine Toolbox zu entwickeln, welche ausgewählte Algorithmen zur Sensitivitätsanalyse (SA) mit repräsentativen geochemischen Speziationscodes kombiniert. Die Ergebnisse all dieser Projektebenen werden dann anhand eines Testfalls bewertet. Schließlich werden eine Methodik zur Modellreduzierung sowie Prioritäten für die künftige Forschung abgeleitet.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP1: State-of-the-Art Bericht zur Sensitivitätsanalyse (ohne direkte Beteiligung HZDR)
- AP 2: Ableitung des reaktiven Transportmodells
- AP 3: Modellparametrisierung und Unsicherheiten
- AP 4: Prototyping einer Toolbox (ohne direkte Beteiligung HZDR)
- AP 5: Anwendung der Sensitivitätsanalyse auf einen Testfall
- AP 6: Modellreduktion und zukünftige Prioritäten
- AP 7: Projektleitung

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Etablierung eines Workflows zur Berechnung von smart  $K_d$ -Werten:

- Modul Lithologie: Verwendung von MLA-Daten von Lausitzer Granit-Dünnschliffen als Trainingsdaten, Simulation von Graniten mittels Truncated Plurigaussian Simulation, Bestimmung der optimalen Größe eines Repräsentativen Volumenelements in 2D
- Modul Geochemie: Berechnung smarter  $K_d$ -Werte unter Verwendung von GWB für den simulierten Granit, Annahme: Wegsamkeiten entlang von Biotitgrenzen aufgrund von alteriertem Biotit in Granitproben.

AP3: Planung und Start von Validierungstests, durchgeführt von ÚJV, unter Verwendung des Lausitzer Granits: Anfertigung von Granitwürfel (Kantenlänge 1cm), Parametrisierung des künstlichen Grundwassers, Diskussion zur Umsetzbarkeit hinsichtlich Validierungsversuch und Berechnung der smart  $K_d$ -Werte verschiedener RN

AP5: Test der Toolbox zur Sensitivitätsanalyse mit Kompositionsdaten

AP7: Monatlich: Online-Meetings von HZDR, TUC und ÚJV (partiell auch mit SÚRAO)

13.-15.02.2024: Besuch von TUC und HZDR bei ÚJV Řež, in Bukov URL und Jozef Gallery URL (organisiert von ÚJV)

19.03.2024: Abgabe Jahresbericht 2023

30.-31.05.2024: Besuch von HZDR und ÚJV bei TUC

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Verwendung von Trainingsdaten (MLA-Daten Lausitz) mit sichtbaren Wegsamkeiten, Überprüfung auf Anwendbarkeit von CT Daten aus Bukov und Grimsel (in 3D)

AP3: Weiterführung der Validierungstests, durchgeführt von ÚJV, unter Verwendung des Lausitzer Granits: CT Messung am HIF, Sorptionstest ÚJV

AP5: Fortführung der Nutzertests der Toolbox zur Sensitivitätsanalyse

AP7: Weiterführung der monatlichen Online-Meetings zwischen HZDR, TUC und ÚJV

Projektmeeting in ÚJV Řež (30.9. / 1.10.2024)

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- A. Duckstein, S. Pospiech, V. Brendler (2024): *Quantitative consideration of heterogeneities in crystalline rocks within geochemical simulations: a modular workflow*, ANNUAL REPORT 2023, Institute of Resource Ecology
- Pospiech, S., Bok, F., Abdelhafiz, M., Duckstein, A., Plischke, E., and Brendler, V.: *Understanding Geological Key Factors for Radionuclide Retention: Insights from Sensitivity Analysis on Varied Crystalline Host Rock Compositions*, EGU General Assembly 2024, Vienna, Austria, 14–19 Apr 2024, EGU24-3471, <https://doi.org/10.5194/egusphere-egu24-3471>, 2024.
- Duckstein, A., Pospiech, S., Tolosana-Delgado, R., and Brendler, V.: *Radionuclide sorption in the far field: Geostatistical simulation of crystalline rock to assess uncertainties due to heterogeneities*, EGU General Assembly 2024, Vienna, Austria, 14–19 Apr 2024, EGU24-1916, <https://doi.org/10.5194/egusphere-egu24-1916>, 2024.
- Pospiech, S., Duckstein, A., Bok, F., Brendler, V.: *A Workflow for Combining Geostatistics with Geochemistry: A Process to Select Features for designing spatial models for crystalline rock*, NEA-CRC7 Meeting, NAGRA, Wetingen, Schweiz, 18<sup>th</sup> – 20<sup>th</sup> June 2024.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Institut für Endlagerforschung, Technische Universität Clausthal, Adolph-Roemer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12112B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Systematic sensitivity analysis for mechanistic geochemical models using field data from crystalline rock (Teilprojekt B im Verbundvorhaben <b>SANGUR</b> )		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.02.2023 bis 31.01.2026	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 249.921,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr.-Ing Mostafa Abdelhafiz	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt SANGUR (Partner: Helmholtz-Zentrum Dresden - Rossendorf e.V., Institut für Ressourceökologie (IRE), und ÚJV Řež, a. s. als Unterauftragnehmer des HZDR) zielt auf ein verbessertes Verständnis und die Einbeziehung von Parameterunsicherheiten im Kontext der nuklearen Entsorgung. Es ebnet den Weg, um denkbare und vertretbare Fehlermargen für alle wichtigen Zielfunktionen innerhalb von Langzeitsicherheitsbewertungen zukünftiger Endlagersysteme in tiefen geologischen Formationen, hier kristallinen Gesteinen, zu gewinnen. Das Projekt baut auf einem umfassenden State-of-the-Art-Bericht (SOTA) über die derzeitige Behandlung von Ungewissheiten durch Sensitivitätsanalysen in geologischen Systemen aus mathematischer Sicht auf, der auch fortgeschrittene Softwareimplementierungen umfasst. Ergänzt wird dies durch eine gründliche Analyse der reaktiven Transportprozesse in kristallinem Gestein und die Ableitung entsprechender Modelle. In einem nächsten Schritt werden diese Modelle unter Einbeziehung realistischer Unsicherheiten parametrisiert. Parallel dazu wird der SOTA-Bericht genutzt, um eine Toolbox zu entwickeln, welche ausgewählte Algorithmen zur Sensitivitätsanalyse (SA) mit repräsentativen geochemischen Speziationscodes kombiniert. Die Ergebnisse all dieser Projektebenen werden dann anhand eines Testfalls bewertet. Schließlich werden eine Methodik zur Modellreduzierung sowie Prioritäten für die künftige Forschung abgeleitet.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP1: State-of-the-Art Bericht zur Sensitivitätsanalyse
- AP2: Ableitung des reaktiven Transportmodells (ohne direkte Beteiligung TUC)
- AP3: Modellparametrisierung und Unsicherheiten (ohne direkte Beteiligung TUC)
- AP4: Prototyping einer Toolbox
- AP5: Anwendung der Sensitivitätsanalyse auf einen Testfall
- AP6: Modellreduktion und zukünftige Prioritäten
- AP7: Projektleitung

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: State-of-the-Art (SOTA) Bericht ist finalisiert (V1).

AP4: Die Software-Version wird von internen und externen Benutzern getestet.  
Feedback der Benutzer wird gesammelt.

AP5: Anwendung der Sensitivitätsanalyse auf einen ersten Testfall mit synthetischen Daten.  
Erste Schritte im Umgang mit kompositorischen Daten für Monte-Carlo Simulationen in UA/SA realisiert.

AP7: Monatlich: Online-Meetings von HZDR und TUC

13.-15.02.2024: Besuch von TUC und HZDR bei ÚJV Řež, in Bukov URL und Jozef Gallery URL (organisiert von ÚJV)

19.03.2024: Abgabe Jahresbericht 2023

30.-31.05.2024: Besuch von HZDR und ÚJV bei TUC

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Die Literaturrecherchearbeit am State-of-the-Art wird fortgesetzt und spezifische Anforderungen werden in einem aktualisierten SOTA-Bericht (V2) dokumentiert.

AP4: Weiterentwicklung der Software-Toolbox nach den Erfahrungen der Benutzer (GUI, GSA-Methoden).  
Externer Testlauf für die Toolbox.  
Erstellung eines Git-Repository für die Versionsverwaltung und Dokumentation des Codes.

AP5: Anwendung der Sensitivitätsanalyse auf einen Testfall mit Felddaten.

AP7: Weiterführung der monatlichen Online-Meetings zwischen HZDR und TUC  
Projektmeeting in ÚJV Řež (30.9. / 1.10.2024)

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- Pospiech, S., Bok, F., Abdelhafiz, M., Duckstein, A., Plischke, E., and Brendler, V.: Understanding Geological Key Factors for Radionuclide Retention: Insights from Sensitivity Analysis on Varied Crystalline Host Rock Compositions, EGU General Assembly 2024, Vienna, Austria, 14–19 Apr 2024, EGU24-3471, <https://doi.org/10.5194/egusphere-egu24-3471>, 2024.
- Abdelhafiz M., Röhlig K., Plischke E.: State-of-the-Art Techniques for Sensitivity Analysis in Geochemical Modeling: Exploring Methods and Tools, Internal Report, TU Clausthal, Clausthal Zellerfeld, 2024.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 12122A	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Stabilität von Mineralphasen des Eisens im Nahfeld eines Endlagers (STAMINA)			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2023 bis 31.03.2026		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 522.440,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Sven Hagemann	

## 1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben verfolgt das Ziel, ein chemisches und thermodynamischen Modell für die Chemie des Eisens im Nahfeld eines Endlagers zu entwickeln. Hierfür werden Ergebnisse aus früheren Vorhaben sowie aus der Literatur zusammengefasst und noch bestehende Erkenntnislücken zum zweiwertigen Eisen durch zusätzliche Experimente geschlossen. Wo erforderlich, soll die Berechnung von Aktivitätskoeffizienten von komplexen Eisenspezies ermöglicht werden. Gemeinsam mit dem Verbundpartner wird die finale Auswahl an thermodynamischen Daten (Pitzer-Koeffizienten, Komplexbildungskonstanten, Löslichkeitskonstanten) dokumentiert und publiziert. Parallel hierzu wird ein Dokument erstellt, das das bestehende Wissen zur Kinetik der Phasenbildung aufbereitet und Empfehlung zur Auswahl von Festphasen bei der Durchführung geochemischer Modellrechnungen gibt.

Die Arbeiten ermöglichen eine wesentlich verbesserte Modellierung der Eisen-Chemie in Systemen mit mittlerer bis hoher Ionenstärke, welche die Verwendung des thermodynamischen Pitzer Modells erfordern. Dieses gilt für die Anwendung in salinaren Lösungen im Kontext der Endlagerung im Wirtsgestein Steinsalz, aber explizit auch für Lösungen, die in norddeutschen Tonformationen auftreten können.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1: Speziation

AP2: Bestimmung der Löslichkeit relevanter Korrosionsphasen

AP3: Erstellung eines Pitzer-Modells für zweiwertiges Eisen

AP4: „Best-Practice“-Dokument zur geochemischen Modellierung von Eisenkorrosionsphasen in salinaren Lösungen (auf Englisch)

AP5: Dokumentation der Datenselektion

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Für das System Fe(II)-Mg-Cl-H<sub>2</sub>O(l) wurden mittels isopiesterischer Versuche drei Linien und für das System Fe(II)-Ca-Cl-H<sub>2</sub>O(l) zwei Wasseraktivitätslinien bei 40°, 60° und 90°C ermittelt. Bei beiden Systemen gab es jedoch bei 60 und 90°C Probleme mit den zur Verhinderung der Oxidationsreaktionen zugegebenen mit Wasserstoff beladenen Palladium-Plättchen. Dies haben sich in einigen Ansätzen teilweise aufgelöst, so dass palladiumhaltige Lösungen entstanden sind. Diese Ansätze müssen ohne Zusatz von Palladium wiederholt werden. Die auswertbaren Ansätze weisen darauf hin, dass die beiden genannten Systeme fast lineare Wasser-Isoaktivitätslinien ausweisen, also fast ideale Mischungen darstellen.

AP2: Die Auswertung der Löslichkeitsversuche im System NaOH-Fe(OH)<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O ergab etwas höhere Eisen- Konzentrationen als sie bislang in der einzigen relevanten Literaturquelle gefunden wurden. Die erste Vermutung war ein Einfluss durch teilweise Oxidation zu Fe(III) oder unzureichende Filtration. Ein Vergleich mit den unabhängig gewonnenen Ergebnissen der Projektpartner im System KOH-Fe(OH)<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O zeigte aber ähnliche Ergebnisse, so dass angenommen wird, dass die neuen Resultate valide sind. Eine Erklärung für die Differenz zu den Literaturdaten steht aber noch aus.

AP3: Auf Basis der neuen Messdaten wurde ein vorläufiges Modell entwickelt, dass die Löslichkeit von Fe(II) in den System NaOH-Fe(OH)<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O und NaOH-NaCl-Fe(OH)<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O gut beschreibt. Ein spezifischer Einfluss von Chlorid auf die Aktivitätskoeffizienten des in alkalischen Lösungen dominierenden Ions Fe(OH)<sub>3</sub><sup>-</sup> ist nicht zu erkennen, die Bildung gemischter Komplexe des Typs FeCl<sub>x</sub>(OH)<sub>y</sub><sup>2-x-y</sup> ist daher unwahrscheinlich.

Ein Vergleich mit Löslichkeitsdaten in anderen Systemen des Typs Na<sup>+</sup>/K<sup>+</sup>-M(OH)<sub>n</sub><sup>x-</sup>-OH<sup>-</sup>-H<sub>2</sub>O zeigt, dass sich die Aktivitätskoeffizienten des Fe(OH)<sub>3</sub><sup>-</sup>-Komplexes, der relevanten Spezies bei hohen OH-Konzentrationen, ähnlich entwickeln wie andere symmetrische Hydroxokomplexe wie z.B. Al(OH)<sub>4</sub><sup>-</sup> oder Sb(OH)<sub>4</sub><sup>-</sup>.

Teilproben für die Analyse der Feststoffe mit der XRD wurden bereits vorbereitet.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Um den Einfluss des Palladiums auf die bisherigen Ergebnisse zu klären und um auch bei sehr hohen Salzkonzentrationen Daten zu gewinnen, werden im nächsten Berichtszeitraum eine bzw. ggf. mehrere weitere Linien ohne Pd-Plättchen für die Systeme Fe(II)-Na,K,Mg,Ca-Cl-H<sub>2</sub>O(l) erstellt.

Durchführung von Vortests mit der Durchflussküvette zur Handhabbarkeit, Oxidation der Lösungen und Wartezeit nach Temperaturänderung. Anschließend Beginn der vorgesehenen UV/VIS-Messungen zur Aufklärung der Chlorokomplexbildung von Fe(II) in salinaren Lösungen.

AP2: Fortführung der Löslichkeitsversuche in Systemen mit Fe(OH)<sub>2</sub>. XRD-Messungen zur Aufklärung der sich gebildeten Festphasen

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe)		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 12122B	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Stabilität von Mineralphasen des Eisens im Nahfeld eines Endlagers (STAMINA)			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2023 bis 31.03.2026		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 239.471,61 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Marcus Altmaier	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Teilprojekt realisiert die im Manteldokument aufgeführten Ziele des Gesamtvorhabens durch KIT-INE. Im Detail soll anhand von Erkenntnissen aus früheren Vorhaben, weiteren Messdaten aus der Literatur sowie neuen experimentellen Arbeiten in STAMINA ein Pitzer-Modell für zweiwertiges Eisen unter expliziter Berücksichtigung von komplexen Spezies erstellt werden. Die Löslichkeit relevanter Fe(II)-Festphasen soll unter salinaren, endlagerrelevanten Bedingungen ermittelt werden. Die mögliche Relevanz weiterer Fe(II)- und Fe(III)-Festphasen soll in einer Studie untersucht werden. Gemeinsam mit dem Verbundpartner wird die finale Auswahl an thermodynamischen Daten (Pitzer-Koeffizienten, Komplexbildungskonstanten, Löslichkeitskonstanten) dokumentiert und publiziert. Potentielle Anwender dieser neu entwickelten Datenbasis sollen in einem Handbuch Leitlinien zur Benutzung erhalten.

Dieses Vorhaben nimmt Bezug auf die folgenden laufenden und abgeschlossenen Projekte bzw. FuE-Vorhaben: KORPHA, KORSO, ThermAc3, Fe-RN, ImKorb, ConCorD, MaCoTe, NEA-TDB.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Die Arbeiten von KIT-INE im Rahmen von STAMINA gliedern sich in folgende Arbeitspakete:

AP 1: Speziation.

AP 2: Löslichkeitsmessungen relevanter Eisen-Festphasen unter salinaren Bedingungen.

AP 3: Erstellung eines Pitzer Modells bzw. entsprechender SIT Modelle.

AP 4: „Best-Practice“-Dokument zur geochemischen Modellierung von Eisenkorrosionsphasen in salinaren Lösungen.

AP 5: Dokumentation der Datenselektion.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP 1: (i) Durchführung von EXAFS Untersuchungen (an der INE-Beamline an KARA) im  $\text{Fe}^{3+}\text{-Ca}^{2+}\text{-H}^+\text{-OH}^-\text{-Cl}^-\text{-H}_2\text{O(l)}$  System zur Charakterisierung der wässrigen Eisenspeziation mit Fokus auf potentiell auftretende ternären  $\text{Ca(II)-Fe(III)-(OH)(aq)}$  Komplexe sowie die löslichkeitsbestimmenden Festphase; (ii) Durchführung von EXAFS Untersuchungen an KIT-INE im  $\text{Fe}^{2+}\text{-Ca}^{2+}\text{/K}^+\text{-Cl}^-$  System zur Charakterisierung der wässrigen Eisenspeziation (für den Projektpartner GRS, Präparation der Proben und Durchführung der Messungen durch KIT-INE).

AP 2: (i) Abschluss der Löslichkeitsexperimente mit  $\text{Fe(OH)}_2(\text{cr})$  in KCl Lösung und Weiterführung der Löslichkeitsexperimente in KOH Lösung; (ii) Initiation der Löslichkeitsexperimente mit  $\text{Fe}_2(\text{OH})_3\text{Cl}$  in KCl Lösung; (iii) Weiterführung präliminärer Löslichkeitsexperimente im  $\text{Fe}^{3+}\text{-Ca}^{2+}\text{-H}^+\text{-OH}^-\text{-Cl}^-\text{-H}_2\text{O(l)}$  System; (iv) Vorbereitung und Planung der Löslichkeitsexperimente mit  $\text{Fe(III)}$  aus der Untersättigung in An- bzw. Abwesenheit von Carbonat; (v) Initiierung und Bewertung der Synthese von  $\text{Fe(II)-}$  und  $\text{Fe(III)-Silikat}$ festphasen.

AP 3: (i) Erstellung eines thermodynamischen SIT-Modells für das  $\text{Fe(II)}$  System auf Grundlage der vorläufigen experimentellen Daten; (ii) Anfertigung eines Manuskripts zur Löslichkeit und Thermodynamik von  $\text{Fe(OH)}_2(\text{cr})$  und  $\text{Fe}_2(\text{OH})_3\text{Cl}$ .

AP 4+5: Keine Aktivitäten im Berichtszeitraum geplant.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP 1: (i) Auswertung der durchgeführten EXAFS Untersuchungen im  $\text{Fe}^{3+}\text{-Ca}^{2+}\text{-H}^+\text{-OH}^-\text{-Cl}^-\text{-H}_2\text{O(l)}$  System; (ii) Auswertung der durchgeführten EXAFS Untersuchungen in im  $\text{Fe}^{2+}\text{-Ca}^{2+}\text{/K}^+\text{-Cl}^-$  System (für Projektpartner GRS); (iii) Bewertung und Initiation (Festphasensynthese) von Experimenten im  $\text{Fe(II)-CO}_3$  System.

AP 2: (i) Abschluss der Löslichkeitsexperimente mit  $\text{Fe(OH)}_2(\text{cr})$  in KOH Lösung; (ii) Abschluss der Löslichkeitsexperimente mit  $\text{Fe}_2(\text{OH})_3\text{Cl}$ ; (iii) Ausweitung und Weiterführung der Löslichkeitsexperimente im  $\text{Fe}^{3+}\text{-Ca}^{2+}\text{-H}^+\text{-OH}^-\text{-Cl}^-\text{-H}_2\text{O(l)}$  System; (iv) Initiierung der Löslichkeitsexperimente mit  $\text{Fe(III)}$  aus der Untersättigung in Abwesenheit und Anwesenheit von Carbonat; (v) Synthese von  $\text{Fe(II)-}$  und  $\text{Fe(III)-Silikat}$ festphasen.

AP 3: (i) Erweiterung des thermodynamischen SIT-Modells für das  $\text{Fe(II)}$  System auf Grundlage der experimentellen Daten aus den Löslichkeitsexperimenten mit  $\text{Fe}_2(\text{OH})_3\text{Cl}$ ; (ii) Erstellung eines thermodyn. Modells für das  $\text{Fe(II)}$  System bei hyperalkalischen pH-Werten auf Basis der experimentellen Daten mit  $\text{Fe(OH)}_2(\text{cr})$  in KOH Lösung (in Koop. mit GRS); (iii) Finalisierung des Manuskripts zur Löslichkeit und Thermodynamik von  $\text{Fe(OH)}_2(\text{cr})$  und  $\text{Fe}_2(\text{OH})_3\text{Cl}$ .

AP 4+5: Keine Aktivitäten geplant.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

P. Fürst et al., Posterpräsentation (*Stamina Projekt sowie erste Ergebnisse der Löslichkeitsexperimente im Fe(II) System*), „Tage der Standortauswahl 2024“, 18.04.–19.04.2024, Goslar.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> BGE TECHNOLOGY GmbH		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 12133A
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojket: Weiterführung der Entwicklung von Ausbau von Grubenbauen für ein HAW-Endlager in Tongestein (AGEnT002)“		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm</b> C2.1 - Sicherheits- und Endlagerkonzepte		
<b>Laufzeit des Vorhabens</b> 01.07.2023 bis 31.08.2025	<b>Berichtszeitraum</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 386.567,93 EUR	<b>Projektleiter:</b> Philipp Herold	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Tongesteine als potenzielles Wirtsgestein für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle zeichnen sich unter anderem durch eine geringe hydraulische Leitfähigkeit und eine Sorptionsfähigkeit aus. Dem gegenüber stehen vergleichsweise ungünstige geomechanische Eigenschaften, die sich in einer geringen bis mäßigen Festigkeit und einem potenziellen Kriechverhalten äußern. Hinzu kommen die Eigenschaftsänderungen in Abhängigkeit des Wassergehaltes. Damit ist der Einsatz eines Ausbaus in den Grubenbauen zur Gewährleistung der betrieblichen Sicherheit unvermeidbar. Die Entwicklung eines geeigneten Ausbaukonzeptes bewegt sich im Spannungsfeld zwischen Gewährleistung der betrieblichen Sicherheit während der Einlagerung, dem Nachweis der Langzeitsicherheit sowie der Gewährleistung der Rückholbarkeit und berührt unterschiedliche fachliche Themenbereiche wie etwa Fragen zum Langzeitverhalten/Korrosion oder der geomechanischen Stabilität. Aus dem Themenblock der geotechnisch-numerischen Modellierung und Nachweisführung werden für das Vorhaben drei Teilziele definiert. Es soll eine Weiterentwicklung des Ausbaukonzeptes für langlebige Strecken durch eine vertiefende Planung der Tübbingschale und deren Einzelelemente (u.a. Nachgiebigkeitselemente) erfolgen. Weiterhin sollen erstmalig für Streckenkreuze geeignete Ausbaukonzepte entwickelt und dimensioniert werden. Abschließend soll eine Gesamtsystembetrachtung der 3D-hydromechanisch gekoppelten Berechnungen über die Betriebsdauer und großräumige dreidimensionale Standsicherheitsbetrachtung eines Einlagerungsfeldes erfolgen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP 1 – Vertiefende Planung der Tübbingschale
- AP 2 – Entwicklung und Dimensionierung der Streckenkreuze
- AP 3 – Gesamtsystembetrachtung und Systemanalyse
- AP 4 – Dokumentation und Visualisierung

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Die Geometrie der sich kreuzenden Strecken ist aus dem Vorhaben AGENT bekannt und wurde für die Modellerstellung genutzt. Im Modell wird ein Abzweig einer Strecke von einer Hauptstrecke abgebildet (T-förmig, 90° Winkel). Mit dem initialen Modell konnte die Schädigung im umliegenden Gebirge und speziell dem Kreuzungsbereich ermittelt werden. In den Rand- bzw. Eckbereichen der sich kreuzenden Strecken ist mit Spannungskonzentrationen und erhöhten Schädigungen zu rechnen. Diese Bereiche sollen bei der Auffahrung entfernt werden. Der Querschnitt im Kreuzungsbereich wird damit größer. Aus dem Modell wurden die Spannungen und Verschiebungen für die Dimensionierung der Innenschale ermittelt. Die Größen wurden Knotengenau an die anderen Programme übertragen. Die Dimensionierung erfolgt in SOFISTIK und ATENA.

Für einen Vergleich der unterschiedlichen Softwarepakete wurden zwischen FLAC3D, SOFISTIK und ATENA unterschiedliche Benchmark-Modelle umgesetzt. Betrachtet wurden einfache Plattenmodelle und analytische Modelle. In allen Fällen konnte eine sehr gute Übereinstimmung erzielt werden.

Die Studienarbeit (Modellierung und Simulation zur Auslegung von Tunneltragwerken für radioaktive Endlagerstätten) wurde im Berichtszeitraum abgeschlossen. Aufbauend auf den Ergebnissen wurde eine Masterarbeit (Modellierung und Simulation von Tunneltragwerken für radioaktive Endlager) am Institut für Statik und Dynamik der TU Braunschweig begonnen. Schwerpunkt ist die Modellierung der Streckenkreuzungen auf Basis der bereits festgelegten Geometrie, Durchführung einer Tragwerksanalyse und Aufbereitung der Ergebnisse in SOFiSTiK.

Für die Errichtung des Streckenkreuzes wurden zwei unterschiedliche Auffahrungskonzepte erarbeitet. Auch die Bauwischenzustände sollen während der Errichtung numerisch abgebildet werden. In beiden Konzepten beginnt die Errichtung aus der geschlossenen Tübbingröhre der Hauptstrecke heraus. Der Abzweig wird im ersten Konzept aus einem kleinen Fenster der Tübbingschale heraus errichtet und geweitet; im zweiten Konzept über eine großflächigere Entnahme der Tübbingschale. Die technische Machbarkeit des zweiten Konzeptes ist noch zu bewerten.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Die Arbeiten zur Dimensionierung des Streckenkreuzes mit SOFISTIK und ATENA werden abgeschlossen.

AP3: Umsetzung der Gesamtsystembetrachtung auf Basis der Ergebnisse des AP2 (BGE TEC) und AP 1 (DMT).

AP4: Tübbingschale und Streckenkreuz stellen Komponenten des Endlagers dar. Nach dem Baukastenprinzip werden diese Komponenten visualisiert und in einem Gesamtmodell des Endlagers zusammengefügt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> DMT GmbH & Co. KG		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 12133B	
<b>Vorhabensbezeichnung: AGENT002</b>  Weiterführung der Entwicklung von Ausbau von Grubenbauen für ein HAW-Endlager in Tongestein, Teilprojekt B			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b>  C2.1 Sicherheits- und Endlagerkonzepte			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2023 bis 31.08.2025		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 268.842,23 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Andreas Hucke	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Tongesteine als potenzielles Wirtsgestein für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle zeichnen sich unter anderem durch eine geringe hydraulische Leitfähigkeit und eine Sorptionsfähigkeit aus. Demgegenüber stehen vergleichsweise ungünstige geomechanische Eigenschaften, die sich in einer geringen bis mäßigen Festigkeit und einem potenziellen Kriechverhalten äußern. Hinzu kommen Eigenschaftsänderungen in Abhängigkeit des Wassergehaltes. Daraus resultiert, dass der Einsatz eines Ausbaus in den Grubenbauen zur Gewährleistung der betrieblichen Sicherheit unvermeidlich ist. Die Entwicklung eines geeigneten Ausbaukonzeptes bewegt sich im Spannungsfeld zwischen Gewährleistung der betrieblichen Sicherheit während der Einlagerung, dem Nachweis der Langzeitsicherheit sowie der Möglichkeit der Rückholung und berührt unterschiedliche fachliche Themenbereiche wie etwa Fragen zum Langzeitverhalten/Korrosion oder der geomechanischen Stabilität.

Der beschriebene Sachverhalt stellte für BGE TECHNOLOGY GmbH und DMT GmbH & Co. KG die Motivation dar, geeignete Ausbausysteme für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle in Tongestein im Rahmen des FuE-Vorhabens AGENT zu entwickeln. Aufbauend auf diesen Arbeiten sollen mit dem vorliegenden Vorhaben (AGEnT002) diese Entwicklung weitergeführt werden. Dies beinhaltet eine Weiterentwicklung des Ausbaukonzeptes für langlebige Strecken und ein Streckenkreuz zwischen denen sowie eine Gesamtsystembetrachtung eines Einlagerungsfeldes in Form hydromechanisch-gekoppelter Berechnungen über die Betriebsdauer und großräumige 3D-Standsicherheitsbetrachtung des Gesamtendlagers. Ziel des Vorhabens ist die Erarbeitung eines Gesamtkonzeptes für den Ausbau für verschiedene Arten von Grubenräumen in verformbarem Tongestein.

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP 1: Vertiefende Planung der Tübbingsschale nach EC2

AP 2: Entwicklung und Dimensionierung der Streckenkreuze

AP 3: Gesamtsystembetrachtung und Systemanalyse

AP 3.1: Gesamtsystembetrachtung

AP 3.2: Systemanalyse

AP 4: Dokumentation und Visualisierung

### **3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse**

Die für das AP 1 begonnenen Arbeiten wurden fortgesetzt. Dazu wurde für das numerische Basismodell ein Parametersatz festgelegt, der den „durchschnittlichen“ Gebirgseigenschaften für ein Tongestein entspricht. Neben der Festlegung der gebirgsmechanischen Parameter für die Modellierung war die Ermittlung eines geeigneten Stoffgesetzes zur Nachbildung des anisotropen Verhaltens des Tongesteins von entscheidender Bedeutung. Es muss in der Lage sein, das anisotropen Verhaltens sowie das Kriechverhalten des Tongesteins nachzubilden. Hierzu wurden eine Vielzahl von Untersuchungen durchgeführt mit dem Ergebnis, dass das in FLAC3D implementierte SUBI-Modell sich als am besten geeignetes Stoffmodell herausstellte. Hiermit können einerseits die anisotropen Festigkeitseigenschaften mit der Entfestigung sowohl der Gesteinsmatrix als auch der mittels Anisotropie modellierten Trennflächeneigenschaften darzustellen. Andererseits lässt sich dieses Stoffgesetz mit dem NORTON-Kriechgesetz koppeln, wofür auch bereits Parameter in der Literatur vorhanden sind. Mit diesem Ansatz ist es lediglich nicht möglich, eine Anisotropie der elastischen Parameter mit zu berücksichtigen. Aber dieser Nachteil erwies sich als nicht so gravierend, wie eine mögliche Nichtberücksichtigung des Entfestigungsverhaltens.

Mit dem erarbeiteten Stoffmodell und den ermittelten Basisparametern wurde ein dreidimensionales Modell in FLAC3D erstellt, in welchem eine geplante Hauptstrecke mit einem definierten Ausbausystem aufgeföhren werden konnte. Als Ausbausystem kommt ein Tübbingausbau mit einer Hinterfüllung zum Einsatz. Für die Nachbildung dieses Ausbaus wurde bereits zu Beginn des Projektes festgelegt, das erstellte FLAC3D-Modell mit einem 3DEC-Modell zu koppeln, mit welchem eine realitätsnahe Nachbildung des Tübbingausbausystems gewährleistet werden kann. Dazu wurden die Belastungen aus dem FLAC3D-Modell auf den Ausbau zu verschiedenen Zeitpunkten ermittelt (während der Aufföhren, nach Fertigstellung der Aufföhren, unter Berücksichtigung von Kriechprozessen) und die Daten auf das 3DEC-Modell transferiert. Hier ergaben sich zu Beginn der Untersuchungen leichte Schwierigkeiten, weil geringfügig unregelmäßige Belastungen, ermittelt aus dem FLAC3D-Modell, deutliche Auswirkungen auf das Verhalten der Tübbingsegmente hatten und zu sehr ungleichmäßigen Verformungen führten. Demzufolge waren Anpassungen bei der Ausbaumodellierung im FLAC3D erforderlich, um die Belastungen zu vergleichmäßigen. Dies ist erfolgt und die angepassten Modelle werden nun getestet. Mit dem Projektpartner BGE TEC wurden parallel mögliche Auswertemöglichkeiten, wie z.B. das Dilatanzkriterium diskutiert und abgestimmt, um die Ergebnisse der unterschiedlichen Modellierungen synchronisieren zu können.

Für das AP 3 ist es geplant, das Gesamtsystem für ein mögliches Endlager bzw. eines Teils eines Endlagers nachzubilden und zu analysieren. Dafür ist es geplant, ein System bestehend aus Hauptstrecken (Zugangsstrecken) sowie Einlagerungskammern zu erstellen und gebirgsmechanische Berechnungen durchzuführen. Dafür ist es erforderlich, einen realitätsnahen Zuschnitt für ein potntielles Endlager im Tongestein zu wählen. Im Rahmen des Projektes wurden erste mögliche Zuschnitte, welche für die Gesamtanalyse in Frage kommen könnten, ausgewählt und diskutiert.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Im nächsten Zeitraum werden die Modellierungen der Tübbingsäule fortgesetzt und Designparameter (Spannungen in den Tübbingelementen) für einen möglichen Tübbingausbau werden ermittelt. Mittels dieser Parameter erfolgt anschließend die statische Auslegung der Tübbinge, u.a. auch unter Berücksichtigung der Anforderungen an ein Endlager, wie z.B. Minimierung des Stahleinsatzes. Zu diesem Zweck wurde bereits mit der TU Wien und der Fa. Amberg in Kontakt getreten und mögliche Ansätze diskutiert. Diese Diskussionen werden im folgenden Projektzeitraum weiter vertieft. Parallel werden die Arbeiten für das Arbeitspaket 3 mit der Auswahl und Erstellung eines großräumigen Modells für ein mögliches Endlager im Tongestein begonnen.

### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Keine

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragsnehmer:</b> Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12143</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Feinerkundung der Steinsalzkontur im Bereich zukünftiger Verschlussbauwerke in HAW-Endlagern durch in situ Raman-Spektroskopie (SaRa)	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2023 bis 30.06.2026	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 517.971,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Daniela Freyer

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Ziel des Vorhabens ist die Schaffung der wissenschaftlichen und praktischen Voraussetzungen für die Feinerkundung der Steinsalzkontur im Bereich zukünftiger Verschlussbauwerke in HAW-Endlagern durch eine Kombination aus 3D Kartierung (oder Fotografie) mit ortsauflösender *in situ* Ramanspektroskopie. Dazu wird am Institut für Thermische Verfahrenstechnik, Umwelt- und Naturstoffverfahrenstechnik (ITUN) ein modular zusammengesetztes mobiles Raman-Spektrometer mit 3D Fotografie entwickelt. Dieses muss für eine im Salzgebirge untertage universelle Einsetzbarkeit eine Reihe von Bedingungen erfüllen: Robustheit; Laser geeigneter Wellenlänge für 2 verschiedene Bereiche und genügender Stärke (Minerale liefern Spektren geringerer Intensität als z. B. organische Materialien); schnelle Positionierbarkeit des Messkopfes am Stoß; Verarbeitbarkeit von Spektren mit überlagerter Fluoreszenz; Kombination von Spektrum und optischen Scan der zu vermessenden Fläche; optimierte Messzeiten (Sekunden bis Minuten) zum Erhalt auswertbarer und reproduzierbarer Spektren pro Messpunkt. Die Umsetzung dieser Anforderungen ist wesentlicher Inhalt des FuE-Vorhabens. Die Entwicklung des portablen Raman-Messsystems wird vom Institut für Anorganische Chemie (IfAC) mit Erfahrungen zur ramanspektroskopischen Charakterisierung von Salzmineralen gestützt und begleitet. Gemeinsam werden Testmessungen an Salzprobekörpern im Labor sowie unter *in situ* Bedingungen im ehemaligen Kalibergwerk der Grube Teutschenthal durchgeführt.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Zusammenstellung von Referenz-Ramanspektren der im Steinsalz relevanten Nebenbestandteile und Automatisierung der Differenzierung anhand ihrer Ramanspektren
- AP2: Aufbau, Inbetriebnahme und Automatisierung des Ramanmesssystems
- AP3: Mögliche Algorithmen zur Erhöhung der Selektivität
- AP4: Einfluss der Messparameter auf das Auflösungsvermögen und die Analysegeschwindigkeit unter *in situ* Bedingungen
- AP5: *In situ* Erprobung der mobilen Raman-Spektroskopie
- AP6: Dokumentation und Berichtserstellung

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Der Algorithmus zur Spektrenzerlegung in Pseudo-Voigt-Peaks wurde weiter verbessert. Jetzt werden insbesondere Banden niedriger Intensitäten besser erkannt und verarbeitet.

Es erfolgte eine Sichtung anderer öffentlich zugänglicher Raman-Referenzdatenbanken (RRUFF-Datenbank, [www.ruff.info](http://www.ruff.info)). Zu einigen Mineralen (beispielsweise Carnallit, Polyhalit, Kainit, Anhydrit, Gips, Hexahydrit, Epsomit – jedoch nicht vollständig für die Salzminerale des ozeanischen Salzsystems und häufigen Begleitmineralen) sind Spektren hinterlegt. Deren Qualität schwankt jedoch erheblich und häufig sind die Messbedingungen und -parameter nicht klar ersichtlich.

AP2: Die bereits entwickelten Komponenten des Laser-Shutter-Systems und der Raman-Sonde wurden zu einem vollständigen und funktionsfähigen Raman-Messsystem kombiniert. Dies besteht nun aus dem Spektrometer, einem 671nm-Laser und einem 785nm-SERDS-Laser (zwischen denen mit dem Laser-Shutter-System flexibel gewechselt werden kann) und der Raman-Sonde. Die entsprechende Software zur Steuerung der beiden Laser wurde im Programm LabVIEW programmiert. Die Halterung, mittels welcher die Raman-Sonden und die 3D-Kamera am Arm des Roboters montiert werden, wurde fertiggestellt. Mit dem soweit entwickelten und fertig aufgebauten Ramanmesssystem wurden erfolgreich erste Messungen an Pulver-Salz-Proben durchgeführt.

AP3: Verschiedene Algorithmen zur Verarbeitung der aufgenommenen Roh-Spektren wurden getestet. Diese Tests umfassen den *modified polynomial* (ModPoly), den *asymmetrically reweighted penalized least squares smoothing* (arPLS) und den machine-learning-basierten UNET Algorithmus, welche bereits früher am ITUN entwickelt wurden. Der UNET-Algorithmus zeigte in der vorliegenden Anwendung die vielversprechendsten Ergebnisse. Einer seiner Hauptvorteile liegt darin, dass neben dem Roh-Spektrum keine weiteren Eingaben erforderlich sind um erfolgreich Untergrund- und Störsignale aus den Messdaten zu entfernen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Die am IfAC vorliegenden und dort bereits vermessenen Salz-Proben sollen systematisch auch mit dem am ITUN neu entwickelten Raman-Messsystem vermessen werden. So kann die Referenz-Datenbank weiterentwickelt. Geräteabhängige Unterschiede in den Spektren können erkannt und entsprechend berücksichtigt werden.

AP2: Die LabVIEW-Steuerung soll erweitert werden, sodass darüber auch die 3D-Kamera, der Roboter-Arm und das Spektrometer bedient werden können.

AP3: Es wird weiter an der Erstellung eines Algorithmus zur automatisierten Spektren-Auswertung auf Basis der dekonstruierten Pseudo-Voigt-Peaks gearbeitet.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Das Projektziel, der Arbeits- und Ergebnisstand wurde auf dem 14. US German Workshop on Salt repository Research, Design and Operation vom 25. bis 28.06.2024 in Manchester, UK vorgetragen: J. Sohr, D. Gokuladas, D. Freyer, A. Bräuer „In situ Raman spectroscopy of rock salt contours in planned drift sealing locations of HAW repositories (SaRa project)“.

<b>Auftragnehmer:</b> Friedrich-Schiller-Universität Jena (FSU)		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 12153A	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern. Kurztitel: EVIDENT			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2023 bis 30.05.2026		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 395.520,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Schäfer	

## 1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das übergeordnete Ziel des Vorhabens ist es, das mechanistische Verständnis der für die Integrität der geotechnischen Barriere kritischen Prozesse unter naturnahen, endlagerrelevanten Bedingungen in geklüfteten Granitsystemen zu erhöhen und eine belastbare prognostizierende Modellierung der Bentonitbuffers und des kolloidgetragenen Radionuklidtransport zur Verfügung zu stellen.

Die Arbeiten sind in das CFM-Projekt am Grimsel Felslabor eingebettet und bauen zum Teil auf den in Kolorado-e<sup>3</sup> (FKZ: 02 E 11759A) erzielten Erkenntnissen auf, betrachten aber auch gänzlich neue Aspekte.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1: Experimentelle Arbeiten

AP2: Modellrechnungen

AP3: Projektkoordination und Qualitätsmanagement

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Experimentelle Arbeiten wurden gestartet. Die Aufbereitung des MX-80 wurde abgeschlossen und die Herstellung von Pellets mit Quarzsand (Korngröße: 50-64  $\mu\text{m}$ ) erfolgreich durchgeführt. Die Aufbereitung der von SKB zur Verfügung gestellten thermisch behandelten MX-80- und FEBEX-Proben wurde ebenfalls begonnen. Aus den thermisch behandelten Proben wurden kleine Bohrkernentnommen, eine von der dem Heater zugewandten Seite und eine Probe der abgewandten Seite. Nach einem online-Treffen mit KIT-INE zur Koordinierung von Zusammenarbeit und Planung von Experimenten fand im Mai 2024 ein erster Aufenthalt des PhD-Studenten von FSU-Seite am KIT-INE statt. Durchgeführt wurde eine initiale Einführung in die LIBD-Methode und erste Messungen von Na-homoionisiertem MX-80 Bentonit und synthetischem Ni-Montmorillonit Suspensionen. Dieser Austausch fand statt, um einen Methodenvergleich zwischen LIBD, NTA und spICP-MS durchzuführen und einen Multimethodenvergleich der Charakterisierung von tonmineralbasierten Nanopartikeln für die Reduktion der Unsicherheiten bei der Quantifizierung der Erosionsexperimente aus AP1 (Labor- und Feldexperimente) zu etablieren.

AP3: Teilnahme am OECD/NEA Crystalline Club (CRC-7) Meeting in Villigen (Nagra) und Vorstellung der kristallinen Arbeiten zur Radionuklidmigration im Felslabor Grimsel (inklusive CFM)

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Ein längerer Aufenthalt am KIT ist geplant, um weitere LIBD-Messungen durchzuführen. Der Abschluss der Aufbereitung der thermisch behandelten Proben und die Gewinnung von Pellets für die Durchführung von Erosionsexperimenten wird angestrebt. Besonderes Augenmerk wird auch auf die kleinsten Teilchengrößenfraktion des Tons  $< 0,2\mu\text{m}$  und dessen Charakterisierung in Zusammenarbeit mit Dr. Lanson (ISTerre, CNRS, Grenoble) liegen. Weiterhin sollen Erosionsexperimente mit den MX-80-Proben mit Quarzsandbeimengungen sowie Plugs aus den unbehandelten und thermisch behandelten Bentonitproben durchgeführt werden. Anschließend sollen vergleichbare Experimente der separierten Tonfraktion des wärmebehandelten Bentonits durchgeführt werden, um den Einfluss des Wärmepulses auf das Erosionsverhalten des Bentonits zu untersuchen.

AP 2 & 3: Bilaterale Treffen mit Projektpartner KIT-INE & GRS zur Koordinierung von Zusammenarbeit an Experimenten und der Umsetzung in modelltechnische Betrachtungen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Schafmeister, M.-T. and Schäfer, T. (2024) Hydrogeologische Aspekte bei der Endlagerung radioaktiver Abfälle. Grundwasser 29, 1-2.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe)		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12153B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern. Kurztitel: EVIDENT		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2023 bis 30.05.2026	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 388.297,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Geckeis	

## 1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das übergeordnete Ziel des Vorhabens ist es, das mechanistische Verständnis der für die Integrität der geotechnischen Barriere kritischen Prozesse unter naturnahen, endlagerrelevanten Bedingungen in geklüfteten Granitsystemen zu erhöhen und eine belastbare prognostizierende Modellierung der Bentonitbuffers und des kolloidgetragenen Radionuklidtransport zur Verfügung zu stellen.

Die Arbeiten sind in das CFM-Projekt am Grimsel Felslabor eingebettet und bauen zum Teil auf den in Kolorado-e<sup>3</sup> (FKZ: 02 E 11759A) erzielten Erkenntnissen auf, betrachten aber auch gänzlich neue Aspekte.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1: Experimentelle Arbeiten

AP2: Modellrechnungen

AP3: Projektkoordination und Qualitätsmanagement

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Aus dem Mock-up Test wurde die gesamte Menge des Bentonitgels gesammelt, das als Folge der Erosion außerhalb des Bentonittrings entstand. Um die Flächenverteilung der Radionuklid-Tracer im Bentonitgel zu untersuchen, wurde die vom Bentonitgel eingenommene Fläche in 3 Ringe unterteilt, die konzentrisch zum Bentonitring lagen. Jeder Ring wurde in 4 Abschnitte unterteilt, so dass insgesamt 12 Abschnitte aus dem Bentonitgel gewonnen wurden. Nach Desorption der Radionuklide mit 4 M HNO<sub>3</sub> und Zentrifugation wurde der Überstand der Proben mittels (SF) ICP-MS analysiert. <sup>237</sup>Np wurde in allen Abschnitten nachgewiesen und die Konzentrationen lagen zwischen  $6 \pm 1$  und  $91 \pm 3$  ng/g. Die höchsten <sup>237</sup>Np-Konzentrationen wurden in zwei benachbarten Abschnitten neben dem Bentonitring auf der Einlassseite des Grimsel Grundwassers gefunden. <sup>233</sup>U war nur in 5 Abschnitten nachweisbar und seine Konzentrationen lagen zwischen  $0.4 \pm 0.1$  und  $1.2 \pm 0.5$  ng/g. <sup>242</sup>Pu und <sup>241</sup>Am Konzentrationen lagen unter den Nachweisgrenzen der (SF) ICP-MS. Die Bestimmung von Radionuklid- und Kolloid-Tracern mittels (SF) ICP-MS wurde für das im Grimsel Felslabor laufende in-situ Experiment (CFM Run 22-02) in den Proben aus dem Elutionstailing weiter fortgesetzt. Dabei konnte die Migration von <sup>237</sup>Np noch bis zu 2500 Stunden nach Beginn des Experiments beobachtet werden, wobei die Konzentrationen nach diesem Zeitraum um circa 1,5 Größenordnungen niedriger lagen als im Maximum der Durchbruchkurve. Dies deutet auf eine verzögerte Freisetzung von Np(IV) aus der Scherzone hin, wobei auch kolloidale Spezies eine Rolle spielen können. Weiterhin wurde die Sorption der Radionuklide an den Wänden des Injektionscocktailbehälters nach Desorption und anschließender (SF) ICP-MS Analyse quantifiziert. Nur geringe Mengen von ca. 2-3% an <sup>232</sup>Th, <sup>233</sup>U, <sup>237</sup>Np, <sup>242</sup>Pu und überraschenderweise ca. 9 % des <sup>243</sup>Am befanden sich an den Wänden des Injektionsbehälters adsorbiert und gelangten daher nicht in die Scherzone. Diese Befunde sind für die Quantifizierung der Tracerwiedererhalte nach den Migrationsexperimenten künftig zu berücksichtigen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Weitere Arbeiten zum CFM Run 22-02, Mock-up-Test sowie LIT werden u.a. durch Analysen mit der ultrasensitiven AMS durchgeführt werden. Der Schwerpunkt dieser Studie liegt auf der Bestimmung des Anteils der Radionuklide (auch im niedrigen Spurenkonzentrationsbereich), die im Bentonitring verblieben sind sowie der Anteil, der in das (oder mit dem) Bentonitgel migriert ist. Die Diffusion von Radionukliden in einem anderen Profil des LIT-Bentonits wird untersucht werden, um weitere Erkenntnisse über die geochemische Speziation der Radionuklid-Tracer im *in-situ* Experiment im Vergleich zu den Befunden aus dem Mock-up-Test zu liefern.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

F. Quinto. Eingeladener Vortrag am „Accelerator Mass Spectrometry and Isotope Research, Institute of Ion Beam Physics and Materials Research, Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR)“, Rossendorf (DE), 20 März 2024. Radionuclide transport in crystalline host rock: insights from the in-situ experiments at the Grimsel Test Site (CH).

F. Quinto. Eingeladener Vortrag am „Laboratory of Ion Beam Physics, ETH“, Zürich (CH), 27 März 2024. Radionuclide transport in crystalline host rock: insights from the in-situ experiments at the Grimsel Test Site (CH).

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 12153C	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern. Kurztitel: EVIDENT			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2023 bis 30.05.2026		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 291.110,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Holger Seher	

## 1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das übergeordnete Ziel des Vorhabens ist es, das mechanistische Verständnis der für die Integrität der geotechnischen Barriere kritischen Prozesse unter naturnahen, endlagerrelevanten Bedingungen in geklüfteten Granitsystemen zu erhöhen und eine belastbare prognostizierende Modellierung der Bentonitbuffers und des kolloidgetragenen Radionuklidtransport zur Verfügung zu stellen.

Die Arbeiten sind in das CFM-Projekt am Grimsel Felslabor eingebettet und bauen zum Teil auf den in Kolorado-e<sup>3</sup> (FKZ: 02 E 11759C) erzielten Erkenntnissen auf, betrachten aber auch gänzlich neue Aspekte.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1: Experimentelle Arbeiten

AP2: Modellrechnungen

AP3: Projektkoordination und Qualitätsmanagement

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Für die CFM-Phase 5 wurde ein möglicher 2. Benchmark zum Kationenaustausch im Bentonit, insbesondere unter Hinzugabe einer Ca-haltigen Festphase (Bassanite) oder eines Ca-angereichertem Grundwassers geplant. Dieser soll im CFM-Verbund als Vorschlag mit dem Namen „Thermodynamic benchmark - Part 2“ eingereicht werden. Der Fokus liegt auf der Auswahl thermodynamischer Daten zum Kationenaustausch und auf dem Einfluss verschiedener konzeptueller und modelltechnischer Herangehensweisen der Simulation eines Laborexperiments. Ertüchtigung des Rechenprogramm COFRAME für probabilistische Analysen und Durchführung erster Testrechnungen für einen einfachen Testfall mit log Normalverteilungen für Sorptionsraten für Radionuklide an Kolloiden.

AP3: Teilnahme inkl. Nach- und Vorbereitung der Besprechungen des Colloid Formation and Migration (CFM) Projekts

Das Vorhaben wurde vom Projektleiter Holger Seher mit einem Vortrag an der Universität Köln vorgestellt.

Das Treffen zum Start der CFM-Phase 5 in Tokio, Japan, wurde vorbereitet.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Start und Koordination des „Thermodynamic benchmark - Part 2“. Weiterführung der Tests zu probabilistischen Rechnungen mit COFRAME. Beginn für erste Rechnungen zur Vorhersage der Ergebnisse in den neu geplanten Feldexperimenten.

AP3: Verteilen des Entwurfs des „Thermodynamic benchmark - Part 2“ an die CFM-Projektpartner

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Auftragnehmer:</b> Karlsruher Institut für Technologie (Universitätsaufgabe)		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12163A</b>	
<b>Vorhabenbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip – Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt A			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2023 bis 30.06.2027		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 870.108,53 EUR		<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Katja Emmerich	

## 1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Im Sandwich-Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2) wird ein großmaßstäbliches in-situ Experiment zu einem vertikalen hydraulischen Verschlussystem nach dem Sandwich-Prinzip im Felslabor Mont Terri (CH) weitergeführt (Folgevorhaben von 02E11799A-C), das durch Laborexperimente unterschiedlichen Maßstabs und durch Modellsimulation unterstützt wird. Das Projekt wird gemeinschaftlich von KIT-IMB/MPA/CMM, GRS und TUBAF durchgeführt. BGR, Swisstopo, ENSI, Enresa, NWMO und NWS nehmen mit Eigenmitteln als assoziierte Partner teil.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1 (GRS, KIT): Weiterführung des In-situ-Experiments

Die kontrollierte Aufsättigung der Verschlussysteme in den beiden experimentellen Schächten wird fortgesetzt und durch Messungen im Verschlussystem sowie dem umgebenden Gebirge überwacht.

AP2 (KIT, TUBAF): Begleitendes Laborprogramm

Es werden weitere halbtechnische Versuche sowie MinSandwich- und Quelldruck-Experimente durchgeführt, die zur Modellkalibrierung und -validierung dienen.

AP3 (GRS, KIT, TUBAF): Interpretative Modellierung

Für den In-Situ-Versuch sowie ausgewählte Laborexperimente werden hydraulisch-mechanisch gekoppelte Modellrechnungen durchgeführt und dabei insbesondere neuere Double-Structure-Materialmodelle kalibriert. Zudem werden komplette Schachtverschlussysteme modelliert.

AP4 (KIT, GRS): Projektkoordination und Dokumentation

Die Koordination des Verbundprojektes liegt bei KIT. Die GRS koordiniert das in-situ Experiment in Zusammenarbeit mit Swisstopo und den beteiligten Mont Terri Partnern.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

**AP1:** Siehe Projektstatusbericht der GRS zu 02E12163B.

**AP2:** Die MiniSandwich Versuche 13 und 14 (Serie 7) wurden nach einer Laufzeit von >1000 d beendet und verbleiben bis zum Ausbau in den Zellen. Die restlichen Zellen wurden gewartet und es wird DS Material für den Einbau neuer Versuche konditioniert.

Zudem wurden Quelldruckversuche mit Calcigel im 1 W Zustand ( $w=2.63\%$ ) und Pearson water A3 gestartet. Die Trockendichte wurde zwischen  $1,53$  und  $1,82 \text{ g/cm}^3$  variiert. Nach der Verdichtung dieses Materials standen die Proben zu Beginn der Aufsättigung unter Restspannungen von  $0,14$  bis  $5,2 \text{ MPa}$ . Der Fluiddruck wurde schrittweise von  $0,1 \text{ MPa}$  auf  $0,5 \text{ MPa}$  erhöht. Bei einer Trockendichte von  $1,53 \text{ g/cm}^3$  wurde nach 20 bzw. 29 d ein Durchbruch beobachtet. Die Quelldrücke sind niedriger als aus vergleichbaren MiniSandwichversuchen erwartet. Der Einfluss der Restspannung auf die Quelldruckentwicklung ist zu klären.

Der HTV-9 wurde mit 10 bar Fluiddruck fortgesetzt. Im Juni wurde der Fluiddruck auf 15 bar erhöht. Anfang Juli ist eine erneute Druckerhöhung auf 20 bar ( $2 \text{ MPa}$ ) geplant. Vor der letzten Druckerhöhung betrug die Gesamtmenge des eingetretenen Fluids  $201,5 \text{ L}$ . Der Volumenstrom betrug vor der Druckerhöhung ca.  $4 \text{ ml/h}$ . Der Porendruck in ES1 war nahezu konstant bei etwa 9,5 bar während der Porendruck in ES2 auf 4 bar anstieg.

**AP3:** Die Berechnung des Anteils der Zwischenschichtporosität an der Gesamtporosität für verschieden Trockendichten am Modellsystem eines reinen Smectits zur Verbesserung des Double-Structure Modells wurde durchgeführt. Während bei einer Trockendichte von  $1,6 \text{ g/cm}^3$  und der Annahme des 2 W Zustandes des Smectits etwa 50% der Gesamtporosität in den Zwischenschichten des Smectits und 50% zwischen den Partikeln (Mikro- und Makroporosität) verteilt sind, steigt der Anteil der Zwischenschichtporosität unter gleichen Annahmen bei einer Trockendichte von  $1,8 \text{ g/cm}^3$  auf 70%. Weitere Arbeiten siehe Halbjahresbericht von GRS und TUBAF zu 02E12163B bzw. 02E12163C.

**AP4:** Der Abschlussbericht des Projektes Sandwich-HP wurde veröffentlicht. Ein Projektmeeting fand am 06./07.03.24 in Leipzig statt. Beim Mont Terri Technical Meeting wurde das Sandwich-Projekt präsentiert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Weiterführung von Aufsättigung und Monitoring der Verschlussysteme in den beiden Experimentalschächten.

AP2: Fortsetzung und Planung Rückbau HTV-9, Vorbereitung HTV-10 sowie Durchführung Quelldruckversuche (Benchmarkversuche mit Calcigel und Charakterisierung Secursol MHP1 (70/30)) und MiniSandwich Versuche (u.a. mit Secursol MHP1 (70/30))

AP3: Siehe Halbjahresbericht von GRS und TUBAF zu 02E12163B bzw. 02E12163C.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Wieczorek, K. et al.: Sandwich-HP - Vertical Hydraulic Sandwich Sealing System. Final Report, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-745, Februar 2024.

Hinze, M. & Emmerich, K.: Hydraulic Shaft Sealing - Status of the Sandwich (SW A) project Mont Terri Technical Meeting (TM-41), Porrentruy (CH), 07.05.2024.

Emmerich, K.: Vertical hydraulic sealing system based on the sandwich principle. Geotechnische Seminarreihe, Institut für Bodenmechanik und Felsmechanik (IBF) am KIT, Juni 2024

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12163B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip – Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2023 bis 30.06.2027	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 314.250,80 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr.-Ing. Matthias Hinze	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Im Sandwich-Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2) wird ein großmaßstäbliches in-situ Experiment zu einem vertikalen hydraulischen Verschlussystem nach dem Sandwich-Prinzip im Felslabor Mont Terri (CH) weitergeführt (Folgevorhaben von 02E11799A-C), das durch Laborexperimente unterschiedlichen Maßstabs und durch Modellsimulation unterstützt wird. Das Projekt wird gemeinschaftlich von KIT-IMB/MPA/CMM, GRS und TUBAF durchgeführt. BGR, Swisstopo, ENSI, Enresa, NWMO und NWS nehmen mit Eigenmitteln als assoziierte Partner teil.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

### **AP1 (GRS, KIT): Weiterführung des In-situ-Experiments**

Die kontrollierte Aufsättigung der Verschlussysteme in den beiden experimentellen Schächten wird fortgesetzt und durch Messungen im Verschlussystem sowie dem umgebenden Gebirge überwacht.

### **AP2 (KIT, TUBAF): Begleitendes Laborprogramm**

Es werden weitere halbtechnische Versuche sowie MiniSandwich- und Quelldruck-Experimente durchgeführt, die zur Modellkalibrierung und -validierung dienen.

### **AP3 (GRS, KIT, TUBAF): Interpretative Modellierung**

Für den In-Situ-Versuch sowie ausgewählte Laborexperimente werden hydraulisch-mechanisch gekoppelte Modellrechnungen durchgeführt und dabei insbesondere neuere Double-Structure-Materialmodelle kalibriert. Zudem werden komplette Schachtverschlussysteme modelliert.

### **AP4 (KIT, GRS): Projektkoordination und Dokumentation**

Die Koordination des Verbundprojektes liegt bei KIT. Die GRS koordiniert das in-situ Experiment in Zusammenarbeit mit Swisstopo und den beteiligten Mont Terri Partnern.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

**AP1:** Die Aufsättigung der Dichtsysteme in beiden Schächten wurde fortgesetzt. Der Injektionsdruck in Schacht 1 wurde im Berichtszeitraum nahezu konstant bei ca. 20 bar absolut gehalten, die Injektionsrate liegt derzeit bei etwa 15 ml/h. Die Sensordaten lassen auf eine vollständige Aufsättigung von DS1 und der unteren Hälfte von DS2 schließen. Die radialen Spannungen in DS1 liegen zwischen 2,0 MPa und 2,6 MPa; in DS2 zwischen 1,0 MPa und 1,2 MPa. Die übrigen Dichtsegmente zeigen eine geringe allmähliche Spannungserhöhung, die auf eine langsame Aufsättigung über das Gebirge zurückzuführen ist. Im Februar führte eine Verstopfung im Bewässerungssystem zu Schwierigkeiten bei der Druckbeaufschlagung. Das Problem wurde Anfang März behoben. In Schacht 2 wurde die Druckbeaufschlagung im Januar auf den Hochdrucktank umgestellt und der Lösungsdruck schrittweise auf etwa 10 bar absolut erhöht und seitdem gehalten. Die Injektionsrate liegt derzeit bei etwa 13 ml/h. Die Sensordaten zeigen die fortschreitende Aufsättigung und einen Quelldruckaufbau (radiale Spannung derzeit 2,0 MPa) des unteren Dichtsegments sowie eine langsamere Aufsättigung der überliegenden Dichtsegmente durch Lösungszutritt aus dem Gebirge. Am 24.03.24 trat ein Ausfall der Feuchtesensoren beider Schächte auf. Im April wurde bei einem Einsatz von Amphos 21 festgestellt, dass das Problem auf die Datenübertragung zurückzuführen ist und die Sensoren selbst intakt sind. Die Datenerfassung für Schacht 2 konnte zwischenzeitlich wiederhergestellt werden, wurde aber Mitte Mai erneut unterbrochen. Bei Wartungsarbeiten Ende Juni wurde die Datenerfassung für die Feuchtesensoren beider Schächte schließlich wiederhergestellt.

**AP2:** Siehe Halbjahresbericht von KIT und TUBAF zu 02E12163A bzw. 02E12163C.

**AP3:** Zur Fortsetzung der HM-Simulationen wurden in Abstimmung mit TUBAF Benchmarktests für Doppelstrukturmodelle konzipiert. Dabei wurde für einen generischen Quelldruckversuch ein einheitlicher Satz von Geometrie- und Stoffparametern festgelegt. Erste Ergebnisse der Simulationen mit leicht verschiedenen Doppelstrukturmodellen in CODE\_BRIGHT und OpenGeoSys werden derzeit analysiert und verglichen. Siehe Halbjahresbericht von TUBAF zu 02E12163C. Des Weiteren wurde für das internationale Modellentwicklungs- und -validierungsprojekt DECOVALEX2027 eine eigene Modellieraufgabe (Task) für das Sandwich-Projekt entwickelt. Der Task beinhaltet die Simulation verschiedener Labor- und HTV-Experimente sowie des In-situ-Experiments des Sandwich-Projekts und wird derzeit von acht verschiedenen Gruppen bearbeitet. Die Task-Leitung (Taskdefinition, Organisation, Ergebniszusammenstellung) hat die GRS. Dazu fand bereits der erste Workshop (Ende April) und ein Interim-Meeting (Anfang Juni) jeweils online statt.

**AP4:** Der Abschlussbericht des Projektes Sandwich-HP wurde im Februar 2024 veröffentlicht. Ein Projektmeeting fand am 06./07.03.24 in Leipzig statt. Beim Mont Terri Technical Meeting (07./08.05.24) wurde das Sandwich-Projekt im Rahmen eines Vortrages präsentiert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

**AP1:** Weiterführung von Aufsättigung und Monitoring der Verschlussysteme in den beiden Experimentalschächten.

**AP2:** Siehe Halbjahresbericht von KIT und TUBAF zu 02E12163A bzw. 02E12163C.

**AP3:** Fortsetzung der Modellkalibrierung und der hydraulisch-mechanischen Simulationen mit dem verbesserten Doppelstruktur-Materialmodell sowie durch Ergebnisse aus dem Sandwich-Task des Projekts DECOVALEX2027.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Wieczorek, K. et al.: Sandwich-HP - Vertical Hydraulic Sandwich Sealing System. Final Report, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-745, Februar 2024.

Hinze, M. & Emmerich, K.: Hydraulic Shaft Sealing - Status of the Sandwich (SW A) project Mont Terri Technical Meeting (TM-41), Porrentruy (CH), 07.05.2024.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Institut für Geotechnik, TU Bergakademie Freiberg, Gustav-Zeuner-Str. 1, 09599 Freiberg		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12163C</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip – Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt C		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2023 bis 30.06.2027	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 456.512,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Thomas Nagel	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Im Sandwich-Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2) wird ein großmaßstäbliches in-situ Experiment zu einem vertikalen hydraulischen Verschlussystem nach dem Sandwich-Prinzip im Felslabor Mont Terri (CH) weitergeführt (Folgevorhaben von 02E11799A-C), das durch Laborexperimente unterschiedlichen Maßstabs und durch Modellsimulation unterstützt wird. Das Projekt wird gemeinschaftlich von KIT-IMB/MPA/CMM, GRS und TUBAF durchgeführt. BGR, Swisstopo, ENSI, Enresa, NWMO und NWS nehmen mit Eigenmitteln als assoziierte Partner teil.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

### AP1 (GRS, KIT): Weiterführung des In-situ-Experiments

Die kontrollierte Aufsättigung der Verschlussysteme in den beiden experimentellen Schächten wird fortgesetzt und durch Messungen im Verschlussystem sowie dem umgebenden Gebirge überwacht.

### AP2 (KIT, TUBAF): Begleitendes Laborprogramm

Es werden weitere halbtechnische Versuche sowie MinSandwich- und Quelldruck-Experimente durchgeführt, die zur Modellkalibrierung und -validierung dienen.

### AP3 (GRS, KIT, TUBAF): Interpretative Modellierung

Für den In-Situ-Versuch sowie ausgewählte Laborexperimente werden hydraulisch-mechanisch gekoppelte Modellrechnungen durchgeführt und dabei insbesondere neuere Double-Structure-Materialmodelle kalibriert. Zudem werden komplette Schachtverschlusssysteme modelliert.

### AP4 (KIT, GRS): Projektkoordination und Dokumentation

Die Koordination des Verbundprojektes liegt bei KIT. Die GRS koordiniert das in-situ Experiment in Zusammenarbeit mit Swisstopo und den beteiligten Mont Terri Partnern.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

**AP1:** Siehe Halbjahresbericht von KIT und GRS, 02E12163A bzw. 02E12163B

**AP2:** Die Fluidruckbeaufschlagung am HTV-9 wurde am 09.02.2023 gestartet. Seitdem wird Pearson Water Typ A.3 von unten in das Sandwich-Sealing-System eingespeist. Nachdem in den ersten 40 Tagen Laufzeit der Druck in mehreren Stufen bis auf 1,0 MPa erhöht wurde, wurde die Stufe von 1,0 MPa anschließend 442 d lang nahezu konstant gehalten. Am 05.06.2024 wurde der Fluidruck weiter auf 15 bar erhöht. Die Spannungen, Porendrücke und die Fluidmenge im System wurden weiterhin aufgezeichnet und der Verlauf beobachtet. Die Entwicklung der axialen Spannungen steht im Einklang mit der Quelldruckentwicklung in den aufsättigenden Dichtsegmenten, während die noch trockenen Segmente entsprechend eine Kompaktion erfahren. Anhand der Wasseraufnahmerate der Segmente lässt sich die Etablierung der Dichtwirkung der quellenden DS erkennen. Zudem werden im DS3 höhere Spannungen erreicht, da aufgrund der höheren Einbaudichte und der zusätzlichen Kompaktion aus dem Quellen der unteren Segmente der verfügbare Porenraum in DS3 geringer anzusetzen ist als in den unteren DS. Es ist vorgesehen den Fluiddruck am 03.07.2024 weiter auf 2,0 MPa anzuheben. Der Versuch wird in enger Abstimmung mit dem KIT weitergeführt.

**AP3:** Zunächst wurden die Geometrien der Oedometer-, MiniSandwich und HTV-Versuche parametrisiert vernetzt. Einerseits umfassen diese zweidimensionalen axialsymmetrische Varianten, andererseits aber auch dreidimensionale Geometrien im Falle des HTV. Letztere wurden so erstellt, dass sie die Wahl lassen, welcher der HTV Varianten gerechnet werden soll und ob diese etwa Sandlinsen oder eine „EDZ“ enthält. Zudem wurden in Abstimmung mit GRS numerische Benchmarktests für Doppelstrukturmodelle konzipiert. Diese sind so ausgelegt, dass die den verschiedenen Modellen einheitlichen Grundbausteine, d.h. erweiterte Wassermassenbilanz, Entwicklung von Mikro- und Makroporosität sowie Quell(spannungs)modell, in definierter Weise zum Tragen kommen und damit einen Vergleich zulassen. Für die Feststoffphase auf der Makroebene wird zunächst ein nichtlinear-elastisches, isotropies Verhalten angenommen, wie es für viele bentonitaugliche Materialmodelle (MCCM, BBM, BExM) als Sonderfall bei hoher Fließspannung erhalten wird. Für die verbleibenden Geometrie- und Stoffparameter wurde dann ein physikalisch sinnvoller, einheitlicher Parametersatz festgelegt. Derzeit werden die Ergebnisse dieses Benchmarktests anhand leicht verschiedener Doppelstrukturmodelle, die in den Programmcodes OpenGeoSys und CodeBright implementiert sind, analysiert und verglichen.

**AP4:** Der Abschlussbericht des Projektes Sandwich-HP wurde im Februar 2024 veröffentlicht. Ein Projektmeeting fand am 06./07.03.24 in Leipzig statt. Beim Mont Terri Technical Meeting (07./08.05.24) wurde das Sandwich-Projekt im Rahmen eines Vortrages präsentiert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

**AP1:** Siehe Halbjahresbericht von KIT und GRS, 02E12163A bzw. 02E12163B

**AP2:** Die Festlegung des Versuchsregimes für die HTV erfolgt in ständiger Absprache mit dem KIT. Vor einer erneuten Fluidruckerhöhung wird abgewartet, wie sich die Drücke im Sandwich entwickeln. Außerdem fließen auch die Ergebnisse der TDR-Messungen in die Entscheidung ein. Des Weiteren sollen technische Erweiterungen des Versuchsstandes geprüft werden.

**AP3:** Weiterführung der Doppelstrukturbenchmarks und Erweiterung auf Elastoplastizität.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Wieczorek, K. et al.: Sandwich-HP - Vertical Hydraulic Sandwich Sealing System. Final Report, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-745, Februar 2024.

Es wurden vier Abstracts für die Clay Conference eingereicht.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12173</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Entwicklung eines salzgrusbasierten Versatzkonzeptes unter der Option Rückholbarkeit – Phase 2 (SAVER)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2023 bis 31.10.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 473.567,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr.-Ing. Mischo	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Im SAVER-Projekt (Phase 1) wurde die Anwendbarkeit des im GESAV-Projekt genutzten Versatzverfahrens auf das patentierte GESAV-Material als auch auf KOMPASS (Salzgrus)-Material weiter untersucht und die Parameter durch entsprechende Messeinrichtungen aufgenommen. Die Realitätsnähe der Versuche wurde weiter gesteigert durch den Einbau von POLLUX-Modellkörpern mit angenäherter Realgröße. Es konnte erfolgreich nachgewiesen werden, dass die Einbaumethode auf beide Materialien anwendbar ist. Durch regelmäßige geochemische Analysen wurden wichtige Erkenntnisse über die internen Prozesse bezüglich der Polyhalitbildung gewonnen.

Während des Einbaus wurden In-Situ-Proben entnommen, welche einen Teil der Datenbasis für das SAVER-II-Projekt bilden. Die Proben werden im Programm hinsichtlich Permeabilität, Dichte, Polyhalitgehalt, Korngefüge, Druckfestigkeit und weiteren Eigenschaften (das komplette Laborprogramm kann der Vorhabensbeschreibung entnommen werden) durch verschiedene Projektpartner untersucht. Ein weiterer wichtiger Teil des Projektes ist der Weiterbetrieb der untertägigen Großversuchsstände und die damit einhergehende Datenanalyse. Die gewonnenen Daten sollen den Projektpartnern sowie Interessenten aus der Forschungscommunity über eine Datenbank zugänglich gemacht werden.

Die Kooperation mit dem vom PTKA geförderten KOMPASS-Projekt (in Zukunft „MEASURES“) soll aktiv weitergeführt werden, da hier bereits sehr produktiv über die Laufzeit von SAVER I zusammengearbeitet wurde.

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

<b>AP1</b>	<b>Untertägiges Messprogramm</b>
AP1.1	Fortsetzung des kontinuierlichen Monitorings der untertägigen Versatzkörper hinsichtlich Setzung, Druck, Feuchtigkeit, elektr. Leitfähigkeit, Permeabilität, Bewetterung
AP1.2	Regelmäßige Auslesung, Auswertung und Analyse der untertägig generierten Datensätze
<b>AP2</b>	<b>Laborprogramm</b>
AP2.1	Auswertung der in SAVER I entnommenen Proben beim Einbau, um Aussagen über das In-Situ-Verhalten beim Einbau von GESAV-, KOMPASS -und qualifiziertem trockenem Salzgrusmaterial mit Fuller-Verteilung treffen zu können
AP2.2	Regelmäßige In-Situ-Probenentnahme aus den Versatzkörpern für mechanische und geochemische Laboruntersuchungen
AP2.3	Untersuchung von möglichen Wechselwirkungen aufeinanderfolgender Versatzmaterialien im Großmaßstab möglich durch zonaren Aufbau der Versatzkörper
AP2.4	Bereitstellung einer Datenbasis für Salzforschungscommunity

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

**AP1:** Das Monitoring der beiden Versatzkörper im Steinsalzbergwerk der GSES GmbH in Sondershausen wird weitergeführt. (AP 1.1 + AP 1.2).

**AP2:** Die in SAVER – Phase 1 entnommenen GESAV-Proben wurden im Labor der TUBAF auf Feuchtigkeitsverlust untersucht. Dabei stellte sich heraus, dass der Verlust seit Einlagerungsbeginn im Mittel bei 0,55 Ma.-% lag. Des Weiteren wurden die Proben für NMR-Untersuchungen zur BGR gegeben, um eine möglichst genaue Restfeuchtebestimmung durchführen zu können. Für die NMR-Untersuchungen wurden 2 GESAV-Proben genutzt. Messungen haben eine Restfeuchte von ca. 2,78 Ma.-% ergeben. Die In-Situ-Messungen der IMKO-Feuchtigkeitssonden ergeben im Mittel eine im Versatzbauwerke verbleibende Restfeuchtigkeit von 1,86 Ma.-%. In GESAV II ergab sich nach 1.800 h Messung eine durchschnittliche Restfeuchte von 3,1 – 3,4 Ma.-%. Da die Messung nach 1.800 h auf Grund technischer Störungen nicht weiterlief, ist über den weiteren Verlauf nichts bekannt. Alle anderen Großversuche (GV 1 – GV 3) ergaben im GESAV-II-Projekt Einbaufeuchten von 0,5 – 2,5 Ma.-%. Es ist daher davon auszugehen, dass die Feuchtigkeit in GV 4 ebenfalls weiter abgenommen hätte (AP2.1).

Das Probenahmeintervall zur Überwachung des Phasenbestandes wurde in Absprache mit der Arbeitsgruppe Salzchemie der TUBAF auf 4 Monate erhöht, da keine kurzfristigen Änderungen zu erwarten sind. Während des letzten Halbjahres konnten keine Veränderungen im Phasenbestand festgestellt werden. Die im März hergestellten Proben für Labor-Druckversuche befinden sich bis zum November (insg. 8 Monate) zur Einlagerung im Trockenschrank bei einer konstanten Temperatur von ca. 40 °C. Damit soll die Temperatur in einem Endlager während der Polyhalitbildung simuliert werden. (AP2.2) Ein Säulenversuch hat gezeigt, dass die gemessene Feuchtigkeitszunahme über der Sohle vermutlich durch Dichtezunahme auf Grund der Sohlenkonvergenz begründet wird (AP2.3).

### 4. Geplante Weiterarbeiten

**AP1:** Der Weiterbetrieb und das kontinuierliche Auslesen und Auswerten der untertägig generierten Daten wird entsprechend Projektplan weitergeführt. In einer studentischen Arbeit soll die Eignung von kapazitiven Sensoren zur Feuchtigkeitsmessung evaluiert werden. Dabei soll insbesondere die Genauigkeit untersucht werden, da diese ggf. eine kostengünstigere Alternative zu den bisher verwendeten IMKO-Sensoren darstellen können. (AP1.1+1.2)

**AP2:** Die in SAVER – Phase 1 gewonnenen Proben gingen ursprünglich zum IfG für das in der Vorhabenbeschreibung vorgesehene Laborprogramm. Untersuchungen der BGR hatten jedoch gezeigt, dass die KOMPASS-Proben auf Grund der geringen Festigkeit, und entgegen der Erwartungen nicht für Triaxialversuche genutzt werden können. Daher wurde das weitere Vorgehen kollektiv von Vertretern der projektbeteiligten Partner (IfG, TUBAF und GRS) bei dem US-German-Workshop vorgelagerten MEASURES-Meeting festgelegt. In dieser Zeit verblieben die Proben beim IfG, da viele der vorhergesehenen Laboruntersuchungen nicht zerstörungsfrei sind und daher die nächsten Schritte mit genauer Überlegung festzulegen sind. Die KOMPASS-Proben sollen weiter zwischengelagert werden und das geplante Laborprogramm auf Grund der unerwarteten Ergebnisse der KOMPASS-Proben-Triaxialversuche (AP2.1) nochmals mit dem IfG konkretisiert werden.

Für September ist die Entnahme von Kernen durch die TUBAF aus beiden Versatzkörpern geplant. Die Vorbereitungen sind aktuell in Planung und werden mit den entsprechenden Stellen koordiniert. Die dadurch gewonnenen zylindrischen Proben sollen im Labor der TUBAF auf ihre Druckfestigkeit untersucht werden (AP 2.2).

Der bereits begonnene Aussaigerversuch wird weiter fortgeführt. (AP2.3) Die vollständige Bereitstellung einer Datenübersicht ist zum Projektende geplant, jedoch werden bereits jetzt aktuelle Forschungsdaten mit Institutionen wie der GRS und BGR geteilt. (AP2.4)

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

März 2024: WMSYM 2024 in Phoenix, USA (Vortrag und Proceedings)

April 2024: EGU Meeting 2024 in Wien, Österreich (Vortrag)

## **2.2 Vorhaben Bereich D1 – D3**

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Technische Universität Clausthal, Adolph-Roemer-Straße 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11849A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> D2.1 Long-Term Governance C3.2 Methodische Grundlagen der Nachweisführung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 3.003.244,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Klaus-Jürgen Röhlig	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden.

Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

Im TAP SAFE wird transdisziplinär untersucht, ob und inwieweit Sichtweisen von Nicht-Spezialisten nahelegen, das Konzept des Safety Case (SC) anzupassen oder weiterzuentwickeln, um so die Diskurs- und Beratungsfähigkeit zu verbessern. Das Institut für Endlagerforschung, Fachgebiet für Endlagersysteme (ELS) koordiniert das TAP und bearbeitet mit weiteren Partnern die Module „Analyse“, „Synthese und Konzept“, „Transdisziplinäre Kommunikation und Auswertung“, „Ergebnisdarstellung von Modellrechnungen“ sowie „Berichterstattung und Empfehlungen“. Der Lehrstuhl für Geomechanik und multiphysikalische Systeme (GEMS) leistet Forschungsarbeiten in den Modulen „Transdisziplinäre Kommunikation und Auswertung“ und „Analyse des langzeitigen Systemverhaltens von Tiefenlagern“. Der Arbeitsschwerpunkt der risicare GmbH (im Unterauftrag) ist das Thema „Ungewissheiten“. In einem Verfahren, das die Rückholung eingelagerter Abfälle im Falle einer ungünstigen Entwicklung des Lagers vorsieht, muss man sich frühzeitig Gedanken machen über Monitoring-Strategien, Entscheidungswege, Entscheidungsträger und Verantwortlichkeiten. Dies ist Gegenstand des TAP TRUST, in dem GEMS zu Fragen des Monitorings forscht.

Das IELF koordiniert gemeinsam mit dem ITAS das Verbundvorhaben sowie die Außenkommunikation.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Nachfolgend werden die Arbeitsinhalte für das gesamte Verbundvorhaben dargestellt. Zur Zuordnung der Arbeiten zu den Vorhabenpartnern wird auf die Vorhabenbeschreibung verwiesen.

Modul SAFE 1: Analyse: Desk research; Literaturstudie zu Ungewissheiten; Zusammenstellung zu Szenarien; Zusammenstellung von Botschaften und Informationen sowie deren Darstellungen (Indikatoren, Abbildungen)

Modul SAFE 2: Synthese und Konzept: Synthese Modul 1: Gemeinsamkeiten, Schnittmengen; Konzepte und Wahrnehmung von Ungewissheiten; Methodisches Konzept für eine fokussierte empirische Untersuchung

Modul SAFE 3: Transdisziplinäre Kommunikation und Auswertung

Modul SAFE 4: Ergebnisdarstellung von Modellrechnungen, Indikatoren, Ungewissheiten

Modul SAFE 5: Analyse des langzeitigen Systemverhaltens von Tiefenlagern

Modul SAFE 7: Lösungsorientierte Berichterstattung und Empfehlungen

Modul TRUST 4: Analyse des Tiefen-/Endlagerverhaltens im Monitoringzeitraum anhand von numerischen

TH2M-gekoppelten Simulationen: Literaturanalyse; Interaktiver Aufbau einer Gesprächsbasis mit der AGBe; Exemplarische Analyse des offenen / versetzten Tiefen-/Endlagerverhaltens im Monitoringzeitraum anhand von

numerischen TH2M-gekoppelten Simulationen; Diskursiver Dialog mit der AGBe zur Identifizierung von

Anforderungen an die Ausgestaltung von als vertrauenswürdig angesehenen

Monitoringprogrammen; Rückspiegelung an außerwissenschaftliche Akteure / AGBe; Aufbau einer Plattform zur Visualisierung und Illustration von Simulationsergebnissen

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

**ELS (Koordination und Kommunikation):** Das jährliche Arbeitstreffen des Gesamtprojektes wurde in Zusammenarbeit mit den Projektpartnern der FU Berlin vom 28.02.-1.03. durchgeführt. Im Fokus standen Arbeitsberichte der TAPs mit Blick auf den Projektabschluss. Ebenfalls realisiert wurden in diesem Rahmen ein Jour Fixe mit dem Beirat TD und Aufnahmen für einen TRANSENS-Podcast. Insgesamt wurden fünf weitere TRANSENS-Berichte (Nr. 12-16) zur Veröffentlichung begleitet. Es wurden weitere Newsletter versendet. Die Gesprächsreihe „TRANSENS auf der Zielgeraden“ zum Austausch zwischen den Projektpartnern wurde erfolgreich durchgeführt und ausgewertet. Die Vorbereitung der TRANSENS-Abschlussveranstaltung wurde weiterhin koordiniert. Aufgaben wie das Betreuen der TRANSENS-Hotline, der Meetings der I-TD, das Pflegen der Homepage, der Cloud-Zugänge und Artefakt Datenbank und die Koordinationsprechstunde wurden fortgeführt.

**ELS & GEMS: Gemeinsame Arbeiten im TAP SAFE:** Das Thema „Indikatoren“ wurde mit dem Team LUH-IRS weitergeführt, u. a. im Rahmen einer Umfrage unter AGBe-Mitgliedern, in der auch Wahrnehmungen zu Modellrechnungen sowie die Differenzierung von Grenz- und Referenzwerten erhoben wurden. Im Rahmen des TRANSENS-Arbeitstreffens in Berlin (28.02.-1.03.) wurde das Thema gemeinsam mit einem AGBe-Mitglied dem Gesamtprojekt vorgestellt. Mit Beteiligung des gesamten TAP SAFE wurden im Rahmen eines gemeinsam organisierten und ausgewerteten Workshops mit Expert:innen (23.-24.05.) eine Gesamtschau der Ergebnisse von TAP SAFE aus allen vorangegangenen td-Formaten vorgestellt, Feedback eingeholt sowie die Möglichkeiten einer praktischen Umsetzung diskutiert. Das SAFE-Abschlusstreffen (20.-21.06.) in Kassel war Themen der Dokumentation gewidmet, z. B. Ergebnissicherung, SAFE-Abschlussbericht sowie SAFE-Beitrag zum TRANSENS-Abschlussbericht.

**ELS (TAP SAFE, EDU):** Zwei Beiträge zur Zeitschrift „Frontiers in Nuclear Engineering“ sowie ein Beitrag zum als Sammelband erscheinenden TRANSENS-Bericht der Bearbeiter:innen wurden eingereicht und unterliegen einem Review-Prozess. Ein TRANSENS-Bericht mit dem Titel „Indikatoren in Sicherheitsanalysen für Endlager - Eine erste thematische Annäherung“ ist ebenfalls im Review; weitere Ergebnisse wurden in einem Poster aufbereitet und auf den Tagen der Standortauswahl (18.-19.04.) einem Fachpublikum vorgestellt. Auf der Konferenz „Waste Management 2024“ in Phoenix (USA, 10.-14.03.) wurde über das TAP SAFE berichtet. Meilenstein 16 wurde erreicht.

**GEMS (TAP SAFE, TAP TRUST, EDU):** Die Entwicklung von multiphysikalischen Simulationen im Tongestein wurde ebenso wie die Ergebnisdokumentation fortgeführt. Darüber hinaus wurden zwei Vorlesungen im Rahmen der TRANSENS-Ringvorlesung abgehalten sowie eine weitere Vorlesung an der TU Braunschweig („Nachhaltigkeit im

Bauwesen“) personell und inhaltlich unterstützt. TAP SAFE-spezifisch wurde ein Globalmodell für weitere numerische Simulationen diskretisiert. Weiterhin erfolgte die umfassende Auswertung und Dokumentation der bisher in Modul 5 durchgeführten Arbeiten. TAP TRUST-spezifisch erfolgte die umfassende und abschließende Auswertung und Dokumentation der in Modul 4 durchgeführten Arbeiten.

**risicare:** Ein transdisziplinärer Workshop zum Thema „Endlager im Raum unter Tage“ wurde mit Vertreter:innen von AGBe und DBG durchgeführt (26.04.). Zur Arbeit gehörte Literaturanalyse sowie die Fertigstellung des TRANSENS-Berichts und Einreichung zum Review. Zum Thema „Ungewissheiten bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle“ wurde letztes Proofreading am Sammelband durchgeführt und Erkenntnisse an den Tagen der Standortauswahl in Goslar (18.-19.04.) vorgestellt. Beiträge zum Abschlussworkshop des TAP SAFE in Frankfurt und zum Abschlussbericht wurden neben fortlaufender Arbeit in Sprecherteam und I-TD geleistet.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

**ELS (Koordination und Kommunikation):** Das Projekt wird zum Ende des regulären Förderzeitraums begleitet. Die Abschlussveranstaltung in Hannover (13.-14.9.) wird in Unterstützung des Teams LUH-IRS mitorganisiert und durchgeführt. Etwa 10 weitere TRANSENS-Berichte sind auf dem Weg zur Veröffentlichung, darunter der derzeit in der Kommentierungsphase befindliche Sammelband „Transdisziplinäre Ansätze in der nuklearen Entsorgungsforschung“. Der TRANSENS-Podcast ist in Endredaktion und wird im Sommer veröffentlicht. Die Abschlussdokumentation mit besonderem Fokus auf dem Abschlussbericht wird erstellt und bereitgestellt.

**ELS (TAP SAFE, EDU):** Für das kommende Halbjahr sind die Veröffentlichung der drei im Review befindlichen Artikel sowie eines TRANSENS-Berichtes geplant. Ein SAFE-Abschlussbericht wird erstellt. Beiträge dazu sowie zum TRANSENS-Abschlussbericht, welche als TRANSENS-Berichte erscheinen werden, sind in Vorbereitung. Ein Beitrag zur TRANSENS-Abschlussveranstaltung ist ebenfalls in Vorbereitung.

**GEMS (TAP SAFE, TAP TRUST, EDU):** Zukünftig sollen weitere numerische Simulationen im Tongestein mit dem 1- und 2-Sohlen-Lokalmodell durchgeführt werden. Darüber hinaus wird weiterhin an der Ergebnisdokumentation im Hinblick auf den Abschlussbericht gearbeitet (SAFE M19). Im Rahmen der kostenneutralen Verlängerung des TRANSENS-Projektes soll darüber hinaus ein Workshop mit Student:innen durchgeführt werden, um möglicherweise resultierende Trade-Offs bezüglich Vertrauensaufbau durch ein 2-Sohlen-Endlagerbergwerk mit Anordnung einer zusätzlichen Überfahrungssohle in Verbindung mit Monitoringbohrlöchern zu diskutieren.

**risicare:** Es ist Mitarbeit am Abschlussbericht des TAP SAFE und des Gesamtprojekts sowie an der Dokumentation des SAFE-Abschlussworkshops geplant sowie Beiträge zur Abschlussveranstaltung und zu laufenden Aufgaben des Sprecherteams.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Eckhardt, A. (2024): Wie viel Ungewissheit ist akzeptabel?, in: Entscheidungen in die weite Zukunft. Ungewissheiten bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle, Springer VS, Wiesbaden 2024, S. 207–228, DOI: [https://doi.org/10.1007/978-3-658-42698-9\\_11](https://doi.org/10.1007/978-3-658-42698-9_11), [https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-658-42698-9\\_11](https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-658-42698-9_11)

Eckhardt, A. et al. (2024): Das Unbekannte vorausdenken: Entscheidungen unter Ungewissheit und zum Umgang mit Ungewissheiten, in: Eckhardt, A. (Hg.), Entscheidungen in die weite Zukunft. Ungewissheiten bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle, Springer VS, Wiesbaden 2024, S. 383–403, DOI: [https://doi.org/10.1007/978-3-658-42698-9\\_18](https://doi.org/10.1007/978-3-658-42698-9_18), [https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-658-42698-9\\_18](https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-658-42698-9_18)

- Eckhardt, A. et al. (2024): Entscheidungen in die weite Zukunft. Ungewissheiten bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle, Springer VS, Wiesbaden 2024, ISBN: 978-3-658-42698-9, DOI: <https://doi.org/10.1007/978-3-658-42698-9>, <https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-658-42698-9>
- Heiermann, M., Kogiomtzidis, A., Othmer, J. A., Lux, K.-H. (2024): Indikatoren in der Kommunikation von Endlagersicherheit - Ergebnisse eines transdisziplinären Workshops. In Röhlig, K.-J. (Hrsg.), 2024. 4. Tage der Standortauswahl 18./19.04.2024 in Goslar. Tage der Standortauswahl, 18.-19.04.2024, Goslar, Clausthal-Zellerfeld. <https://doi.org/10.21268/20240416-1>
- Muxlhanga, H., Othmer, J.A., Sträter, O., Lux, K.-H., Wolters, R., Feierabend, J. & Sun-Kurczinski, J.Q. (2024): Ein erster methodischer Ansatz zur Identifikation von Ungewissheiten bei der individuellen Durchführung der Materialparameterermittlung für numerische Simulationen aus arbeitspsychologischer Sicht. Beitrag in Eckhardt, A. et al. (Hrsg.). (2024). Entscheidungen in die weite Zukunft: Ungewissheiten bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle (1. Aufl.). Springer Fachmedien Wiesbaden. <https://doi.org/10.1007/978-3-658-42698-9>
- Muxlhanga, H., Othmer, J. A. (2024): Ungewissheiten bei der Materialparameterermittlung für numerische Simulationen aus arbeitspsychologischer Sicht. In Röhlig, K.-J. (Hrsg.), 2024. 4. Tage der Standortauswahl 18./19.04.2024 in Goslar. Tage der Standortauswahl, 18.-19.04.2024, Goslar, Clausthal-Zellerfeld. <https://doi.org/10.21268/20240416-1>
- Othmer, J. A., Lux, K.-H., Wolters-Zhao, R. (2024): Erkenntnisse aus drei transdisziplinären Workshops mit Vertretern der interessierten Öffentlichkeit zur Thematik des Endlagermonitoring. In Röhlig, K.-J. (Hrsg.), 2024. 4. Tage der Standortauswahl 18./19.04.2024 in Goslar. Tage der Standortauswahl, 18.-19.04.2024, Goslar, Clausthal-Zellerfeld. <https://doi.org/10.21268/20240416-1>
- Röhlig, K.-J. (2024): Optimizing the Safety Case Based on Input by Non-Specialists?. WM2024. Education & Opportunity in Radwaste Management, 14.03.2024
- Röhlig, K.-J. (2024): Der Safety Case als Grundlage für Entscheidungen unter Ungewissheit, in: Entscheidungen in die weite Zukunft. Ungewissheiten bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle, Springer VS, Wiesbaden 2024, S. 229-251, DOI: 10.1007/978-3-658-42698-9\_12, [https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-658-42698-9\\_12](https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-658-42698-9_12)
- Röhlig, K.-J. (2024): Ungewissheiten bezüglich der Langzeitsicherheit von Endlagern: Qualitative und quantitative Bewertung, in: Entscheidungen in die weite Zukunft. Ungewissheiten bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle, Springer VS, Wiesbaden 2024, S. 253–281, DOI: [https://doi.org/10.1007/978-3-658-42698-9\\_13](https://doi.org/10.1007/978-3-658-42698-9_13), [https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-658-42698-9\\_13](https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-658-42698-9_13)
- Wolters-Zhao, R., Othmer, J. A., Lux, K.-H. (2024): Der FTK-Simulator: ein leistungsstarkes Simulationsinstrumentarium. In Röhlig, K.-J. (Hrsg.), 2024. 4. Tage der Standortauswahl 18./19.04.2024 in Goslar. Tage der Standortauswahl, 18.-19.04.2024, Goslar, Clausthal-Zellerfeld. <https://doi.org/10.21268/20240416-1>

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Philosophisches Seminar		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11849B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> D2.1 Long-Term Governance		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 31.03.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.375.945,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Konrad Ott	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden.

Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

Die Arbeitsgruppe an der CAU ist Projektpartner im TAP DIPRO.

Dialog und Diskurs sind Schlüssel zur Verständigung. Wie muss der langwierige Prozess gestaltet werden, um dafür gute Bedingungen auf dem Entsorgungspfad zu schaffen? Das ist Gegenstand der transdisziplinären Forschung im TAP DIPRO.

Am Philosophischen Seminar und am Institut für Informatik werden in interdisziplinärer Kooperation (i) Narrative des Entsorgungsdiskurses analysiert, (ii) eine Theorie von "wicked communication" entwickelt, (iii) gesellschaftliche Steuerungsmedien bewertet, (iv) Nachvollziehbarkeit und Transparenz des Entsorgungsprozesses wissenschaftstheoretisch untersucht und über Visualisierungen für den transdisziplinären Forschungsmodus aufbereitet, unterstützend wird hierzu (v) eine Multimediawerkstatt aufgebaut.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Arbeitsprogramm in DIPRO zeichnet sich durch eine disziplinäre Aufbereitung von Sachverhalten, die interdisziplinäre Verständigung darüber und im Kern der Forschungsarbeit durch Workshops aus, bei denen verschiedene transdisziplinäre Formate entsprechend der Themensetzung zur Anwendung kommen werden. Im ersten Projektjahr soll zudem eine eigens für DIPRO gebildete Begleitgruppe aus wenigen Laien eingesetzt werden, die die Gestaltung und die Inhalte der Workshops über die Projektlaufzeit hin reflektiert. Die zentralen Forschungsfragen, die DIPRO an die Begleitgruppe und die Workshops stellt, sind:

1. Welche normativen Voraussetzungen, praktischen Anforderungen und gesellschaftlichen Erwartungen gilt es, für ein gerechtes und resilientes Verfahren und den jeweiligen Entsorgungspfad zu berücksichtigen?
2. Welche gesellschaftlichen Erwartungen und Ansprüche an eine zielführende Endlager-Governance und Öffentlichkeitsbeteiligung lassen sich identifizieren und wie können diese in politische Maßnahmen einfließen?
3. Wie ist das Standortauswahlverfahren unter Bedingungen von „wicked problems“ und „wicked communication“ im Sinne von „good governance“ auszugestalten?

Neben anwendungsorientierter Grundlagenforschung (desk-research, Experimente) bestehen die wesentlichen Arbeitspunkte des Kieler Teilprojektes in der Entwicklung, Durchführung und Evaluation transdisziplinärer Formate (Workshops, Multimediawerkstatt, Informationsdesigns). Inhaltliche Schwerpunkte liegen auf Verfahrensgerechtigkeit, Kommunikation und Standortverantwortung.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Weiterentwicklung Kommunikationsstrukturen innerhalb DIPROs
- Fortsetzung Aufarbeitung des Forschungsstandes inter- und transdisziplinärer Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle
- Kontinuierliche Arbeit mit der DIPRO-Begleitgruppe (DBG): monatliche Teeküche; Planung des Beitrags der DBG zur Abschlussveranstaltung
- Weiterentwicklung der VR-Anwendung zur Visualisierung von endlagerrelevanten Zeiträumen
- Teilnahme an regelmäßigen TD-Treffen mit anderen TAPs.
- Mitarbeit an der Dokumentation und Auswertung von Workshop F in Hannover
- Abgeschlossene Betreuung von zwei Masterarbeiten zu VR-Endlager-Zeitanwendung
- Weitere Publikation zu VR Anwendung
- Mitherausgabe des Sammelbands zur Standortvereinbarung.
- Begutachtung eines Beitrags für *Progress in Nuclear Energy*
- Verfassung eines Beitrags zum Thema Zukunftsbezug in den Diskursen zur Entsorgung radioaktiver Abfälle in Deutschland und Argentinien.
- Teilnahme und Vortrag (C. Loos) an den „Tagen der Standortauswahl“ in Goslar. *Philosophisch-ethische Politikberatung als Konsens- und Dissensmanagement im Akzeptabilitätsdiskurs der Endlagersuche* (18.–19.04.2024 in der Weltkulturerbestätte Rammelsberg Goslar)
- Essay zur Verschiebung der Entscheidung über das Endlager (Ott, Röhlig, von Hirschhausen), der FAZ zum Druck angeboten.
- Verfassung eines Beitrags für das TRANSENS-Magazin
- Vorbereitung der TRANSENS-Abschlussveranstaltung in Hannover
- Vorbereitung eines Workshops zum Thema intergenerationelle Gerechtigkeit für das Forum Zwischenlagerung der BGZ in Herbst (in Zusammenarbeit mit Team DIPRO-TUB)
- CAU-Proseminar mit TRANSENS-Bezug durchgeführt von Christian Loos mit dem Titel „Einführung in die Philosophie und ethische Praxis der Technikfolgenabschätzung“

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterentwicklung der VR-Anwendung
- Auswertung der Workshopreihe E
- Zwei Aufsätze zur Kompensatorischen Gerechtigkeit in der Endlagerung (Sierra & Ott)
- Veröffentlichungen zur intergenerationellen Gerechtigkeit und zur Transdisziplinarität in der Endlagerung
- Herausgeberschaft und Beitragsbeisteuerung im Sammelband „Institutionenethik“: <https://link.springer.com/book/9783662649909> Beitrag zur ethischen Kritik von Organisationen im exemplarischen Anwendungsbereich der Endlagersuche (Loos)
- Ethische Analyse der Verschiebung der Endlager-Entscheidung (Ott)

## 5. Berichte, Veröffentlichungen

- Becker, F. und Berg, M. (2024) Ungewissheiten und Narrative im Kontext der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle – eine schwierige Beziehung? In: Eckardt, A., Becker, F., Mintzloff, V., Scheer, D. und Seidl, R. (Hrsg.) Entscheidungen in die weite Zukunft – Ungewissheiten bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle. Energiepolitik und Klimaschutz / Energy Policy and Climate Protection, Springer VS Wiesbaden, S. 361-382.
- Berg, M. (2024) Narrative im Kontext der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle. In: Smeddinck, U. und Berg, M. (Hrsg.) Ein Querschnitt durch die Forschung des transdisziplinären Arbeitspakets DIPRO. TRANSENS-Bericht 12, Karlsruhe/Kiel 2024, S. 16-19.
- Bräuer, P., Schwarz, L. und Peters, I. (2024) Gegenstandsbezogene transdisziplinäre Forschung – Reflexionen aus der WebGIS-Studie. In: Smeddinck, U. und Berg, M. (Hrsg.) Ein Querschnitt durch die Forschung des transdisziplinären Arbeitspakets DIPRO. TRANSENS-Bericht 12, Karlsruhe/Kiel 2024, S. 28-32.
- Loos, C.: Kernenergie – all things considered? Zu den Akzeptabilitätsdimensionen ihrer zivilen Nutzung. In: *Energieverantwortung. Beiträge zu ethischen Grundlagen und Zuständigkeiten in inter- und transdisziplinärer Perspektive*. Hrsg. v. Quante, M., A. Kahmen, C. Loos und B. v. Groote-Gotzes. Heidelberg 2024 (Ethics of Science and Technology Assessment, 50), S. 149–169.
- Loos, C., M. Quante, A. Kahmen, B. v. Groote-Gotzes: Einleitung. In: Ebd., S. 1–7.
- Loos, C.: Philosophisch-ethische Politikberatung als Konsens- und Dissensmanagement im Akzeptabilitätsdiskurs der Endlagersuche. In: *4. Tage der Standortauswahl 18./19.04.2024 in Goslar*. Tagungsband. Hrsg. v. Klaus-Jürgen Röhlig. Clausthal-Zellerfeld 2024, S. 46–47. [https://www.ielf.tu-clausthal.de/fileadmin/IELF/documents/Tagungsband\\_4\\_Tage\\_der\\_Standortauswahl\\_Goslar.pdf](https://www.ielf.tu-clausthal.de/fileadmin/IELF/documents/Tagungsband_4_Tage_der_Standortauswahl_Goslar.pdf)
- Ott, K. (2024) Ad Calendas Graecas? Ethische und politische Bemerkungen zum offiziellen „Abschied von 2031“ bei der Endlagersuche. In: Eckardt, A., Becker, F., Mintzloff, V., Scheer, D. und Seidl, R. (Hrsg.) Entscheidungen in die weite Zukunft – Ungewissheiten bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle. Energiepolitik und Klimaschutz / Energy Policy and Climate Protection, Springer VS Wiesbaden, S. 53-72.
- Ott, K. (2024) Zu den Erträgen von transdisziplinärer Forschung. In: Smeddinck, U. und Berg, M. (Hrsg.) Ein Querschnitt durch die Forschung des transdisziplinären Arbeitspakets DIPRO. TRANSENS-Bericht 12, Karlsruhe/Kiel 2024, S. 45-49.
- Ott, K. (2024): Von „Framing“ zu Problembeschreibung, Situationsdeutung und Kontextualisierungen in der Endlagersuche. In: M. Quante, A. Kahmen, C. Loos (Hg.): *Energieverantwortung*. Springer, S. 31-60.
- Ott, K. (2024): Kompensation in der transdisziplinären Endlagerforschung. Ethische Perspektiven. In: Ulrich Smeddinck, Rosa Sierra, Lucas Schwarz (Hrsg.): *Kooperative Gerechtigkeit – blühende Landschaft? Die Standortvereinbarung nach § 10 Abs. 4 S. 3 Standortauswahlgesetz*. Interdisziplinäre Beiträge. Berlin: BWV (im Erscheinen)
- Quante, M., A. Kahmen, C. Loos und B. v. Groote-Gotzes (Hrsg.): *Energieverantwortung. Beiträge zu ethischen Grundlagen und Zuständigkeiten in inter- und transdisziplinärer Perspektive*. Heidelberg 2024 (Ethics of Science and Technology Assessment (ETHICSSCI, volume 50), <https://doi.org/10.1007/978-3-662-64989-3>)
- Sierra, R. (2024) Hoffnung und Zuversicht für 1 Million Jahre. In: Eckardt, A., Becker, F., Mintzloff, V., Scheer, D. und Seidl, R. (Hrsg.) Entscheidungen in die weite Zukunft – Ungewissheiten bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle. Energiepolitik und Klimaschutz / Energy Policy and Climate Protection, Springer VS Wiesbaden, S. 31-52.
- Sierra, R. (2024) Partizipation und Gerechtigkeit in der Standortsuche aus Sicht der transdisziplinären Forschung. In: Smeddinck, U. und Berg, M. (Hrsg.) Ein Querschnitt durch die Forschung des transdisziplinären Arbeitspakets DIPRO. TRANSENS-Bericht 12, Karlsruhe/Kiel 2024, S. 5-9.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Freie Universität Berlin, FB Politik und Sozialwissenschaften		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11849C</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland – TRANSENS, Teilprojekt C		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> D2.1 Long-Term Governance		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 31.03.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 991.894,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> PD Dr. A. Brunnengräber	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS wird transdisziplinär geforscht: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden gezielt in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP), eingebunden. Die Analyse der transdisziplinären Forschungsaktivitäten soll Hinweise liefern, wie die Kommunikation zwischen Wissenschaft und den Beteiligten des Standortauswahlverfahrens sowie der Bevölkerung verbessert werden kann. Spezifische Aktivitäten zielen auf Aus- und Weiterbildung sowie auf die Nachwuchsförderung und den Kompetenzerhalt.

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Die FU Berlin ist zentral am TAP DIPRO beteiligt: Dialoge und Prozessgestaltung in Wechselwirkung von Recht, Gerechtigkeit und Governance. Untersucht werden in interdisziplinärer Kooperation und mittels transdisziplinärer Formate: (1) Narrative und Frames der Entsorgungsdiskurse / „wicked communication“, (2) Charakteristika von „wicked problems“ aus dialogischer Perspektive, (3) Wissensbestände und vertrauensbildende Wissensaufbereitung und –vermittlung sowie (4) Formen und Medien der Regulierung. Die FU Berlin ist zudem in die Begleitforschung zu Transdisziplinarität eingebunden (BegleitTeam.TD). Hier erfolgt die formative und reflektierende Begleitung der TAP-Forschenden und der am Forschungsprozess beteiligten Öffentlichkeit wie der außerakademischen Akteure.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Vorbereitung, Durchführung und Nachbereitung des TRANSENS-Arbeitstreffens im Seminarzentrum der FU Berlin (28.02.-01.03.)
- 2 Fachveröffentlichungen in wissenschaftlichen Zeitschriften, 1 Veröffentlichung in einem Sammelband, 2 Veröffentlichungen in einem TRANSENS-Arbeitsbericht, 1 Tageszeitung
- Disputation zur Dissertation von Lucas Schwarz: „Die Landkarte der Gerechtigkeit. Eine integrative Perspektive auf die nukleare Entsorgung in Deutschland“, 5.4.2024 an der FU Berlin

- Beitrag für die Broschüre zur TRANSENS-Abschlussveranstaltung im September in Hannover
- Betreuung der MA-Arbeit von Jan Sieveking: „KENFO as a Case of State Asset Financialisation in Germany“

#### DIPRO:

- Entwurf für einen Zeitschriftenbeitrag: Synthese – drei Jahre Öffentlichkeitsbeteiligung bei der Standortsuche für ein Endlager (2020 – 2023) des BASE
- Entwurf für einen Zeitschriftenbeitrag: Kernprobleme auf dem Entsorgungspfad / Diskursverschiebungen in der Entsorgungsdebatte

#### BegleitTeam.TD:

- Beginn mit der Synthese der transdisziplinären Forschungserkenntnisse
- Regelmäßige Teilnahme an Online-Treffen

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Vorbereitung TRANSENS-Abschlusskonferenz im September in Hannover
- Fortsetzung der Betreuung der Dissertation von Dörte Themann
- Weitere Analysen zum KENFO, vergleichende Analyse der deutschen und schweizerischen Finanzierung der Entsorgung sowie zur Entsorgungspolitik in Nachbarländern von Deutschland
- Arbeiten zu den Kernproblemen auf dem Entsorgungspfad
- Begutachtung der MA-Arbeit von Jan Sieveking: „KENFO as a Case of State Asset Financialisation in Germany“

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen, Vorträge

##### VERÖFFENTLICHUNGEN:

- Brunnengräber, Achim; Denk, Albert; Themann, Dörte (2024): In: Forschungsjournal Soziale Bewegungen Plus. 37 (1), Hemmnisse zivilgesellschaftlicher Selbstorganisation im Standortauswahlverfahren – Ein Diskussionsbeitrag zur Öffentlichkeitsbeteiligung beim Forum Endlagersuche. Online: <https://forschungsjournal.de/fjsb-plus/brunnengraeber-denk-themann-hemmnisse-zivilgesellschaftlicher-selbstorganisation-im-standortauswahlverfahren/>
- Brunnengräber, Achim; Denk, Albert (2024): Generationenkapital. Der Staat als Zocker. In: Blätter für deutsche und internationale Politik 4/24, S. 9-12. Online unter: <https://www.blaetter.de/ausgabe/2024/april/generationenkapital-der-staat-als-zocker>
- Brunnengräber, Achim; Sieveking, Jan (2024): Wicked financing der Endlagerung. Ungewissheiten, Widersprüche und Herausforderungen bei der Finanzierung der nuklearen Entsorgung in Deutschland – der Staatsfonds KENFO, in: Eckhardt, Anne; Becker, Frank; Mintzlaff, Volker; Scheer, Dirk; Seidel, Roman (2024): Entscheidungen in die weite Zukunft. Ungewissheiten bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle, Wiesbaden: Springer VS, S. 141-165, <https://link.springer.com/book/9783658426972>
- Denk, Albert (2024): Das transdisziplinäre Außen und Innen / Brunnengräber, Achim (2024): Die transdisziplinäre Forschung (tdF) – ein wicked problem: Thesen im Rahmen des Forschungsverbundes TRANSENS. Beide in: U. Smeddinck und M. Berg (Hrsg.) Ein Querschnitt durch die Forschungsaktivitäten des TAP DIPRO. Karlsruhe: Karlsruher Institut für Technologie. <https://doi.org/10.21268/20231205-0>
- Brunnengräber, Achim (2024): Unter die Erdkruste kehren. Die CO2-Emissionen sollen unter Tage gelagert werden, um den Klimawandel aufzuhalten. Doch das wird die Krise nicht stoppen. In: Berliner Zeitung 03.05.2024

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe)		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11849D</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt D		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> D2.1 Long-Term Governance		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 31.03.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 550.967,50 EUR	<b>Projektleiter:</b> Volker Metz, Ph.D.	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland geforscht werden. Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Die Schwerpunkte der Arbeiten des KIT-INE liegen im Modul „Pfadabhängigkeit als Risiko und Herausforderung“ des TAP „Handlungsfähigkeit und Flexibilität in einem reversiblen Verfahren“ (HAFF).

Unsere Arbeiten gliedern sich in das

AP1: „Sicherung von Handlungsfähigkeit im Standortauswahlverfahren und der Betriebsphase“

und das

AP2: „Technische und verfahrenstechnische Komponenten von Entsorgungspfaden und deren Nebenfolgen“.

In diesem Modul werden von uns Fragestellungen überprüft, die im Kontext des Standortauswahlverfahrens für Wärme entwickelnde Abfälle hinsichtlich Reflexivität und Reversibilität des Verfahrens von besonderer Bedeutung sind. Hierzu werden Arbeiten zur Zwischenlagerung und Entwicklung von Tiefenlagersystemen unter Berücksichtigung der technischen Barrieren und deren Implikationen durchgeführt, wobei insbesondere die Verknüpfung von Infrastruktur-, Strahlenschutz- und Betriebssicherheitsaspekten verschiedener Komponenten des Entsorgungspfads analysiert werden. Im weiteren Verlauf des Verbundvorhabens soll gemeinsam mit Partnern des TAP HAFF Haltepunkte definiert werden, an denen der jeweilige Sicherheitsstatus eines Entsorgungspfads überprüft und ein Dialog mit der Bevölkerung angestrebt wird.

Zusammenarbeit im Forschungsverbund TRANSENS: Das Arbeitspaket 2 „Technische und verfahrenstechnische Komponenten von Entsorgungspfaden und deren Nebenfolgen“ wird durch einen Mitarbeiter des KIT-INE geleitet.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Schwerpunkte der Arbeiten des KIT-INE (F. Becker und V. Metz) liegen im Modul „Pfadabhängigkeit als Risiko und Herausforderung“ des TAP „Handlungsfähigkeit und Flexibilität in einem reversiblen Verfahren“ (HAFF).

Im ersten Halbjahr 2024 wurde vom Herausgeberteam, bestehend aus A. Eckhardt (risicare), F. Becker (KIT-INE), V. Mintzlauff (TU-BS), D. Scheer (KIT-ITAS) und R. Seidl (LUH), der TAP-übergreifende Sammelband mit dem Titel *„Entscheidungen in die weite Zukunft Ungewissheiten bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle“* abgeschlossen und als Open Access in Rahmen der Springer Reihe *„Energiepolitik und Klimaschutz“* online gestellt. KIT-INE ist an diesem Sammelband mit vier Beiträgen beteiligt (Becker und Berg (2024), Eckhardt, Becker et al. (2024), Seidl, Becker et al. (2024), Scheer, Becker et al. (2024) - siehe Abschnitt 5. Berichte, Veröffentlichungen).

F. Becker und V. Metz beteiligen sich an dem TRANSENS-Bericht *„Aspekte im Hinblick auf eine Neugenehmigung von HAA-Zwischenlagern nach 40 Jahren Betriebszeit“*, der in Zusammenarbeit mit J. Neles vom Ökoinstitut, Th. Hassel von der Leibniz Universität Hannover, I. Scharf und Th. Leusmann von der TU Braunschweig entsteht.

Beim TRANSENS Arbeitstreffen vom 28. Februar bis 1. März in Berlin hielten F. Becker und V. Metz zusammen mit T. Hassel einen Vortrag zum Thema *„Erfahrungen aus dem gegenseitigen Austausch zwischen Bevölkerung und Forschenden“*, dessen Inhalte im Magazin zum TRANSENS-Projekt beschrieben wird.

F. Becker und V. Metz nahmen regelmäßig an den Online- bzw. Präsenztreffen des TAP-HAFF teil. Darüber hinaus beteiligte sich F. Becker an den Besprechungen der EL-Nano-Lesegruppe (KIT-ITAS), des Herausgeberteams zum o.g. Sammelband, der TD-Interessierten (ETH Zürich) und der TRANSENS-Bearbeiter\*innen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Der Entwurf des TRANSENS-Berichts *„Aspekte im Hinblick auf eine Neugenehmigung von HAA-Zwischenlagern nach 40 Jahren Betriebszeit“* soll nach einer Begutachtung durch ein Mitglied des TRANSENS Sprecherteams / I-TD im Herbst 2024 fertiggestellt werden. Der Manuskriptentwurf mit dem Arbeitstitel *„Betrachtungen zur Option der direkten Endlagerung von in Deutschland vorhandenen Transport- und Zwischenlagerbehältern der CASTOR-Familie in tiefen geologischen Formationen“* soll mit T. Hassel fertiggestellt und zur Publikation in der Zeitschrift *„atw – International Journal for Nuclear Power“* eingereicht werden.

Neben wenigen Online- oder Präsenztreffen im Arbeitspaket TAP HAFF ist eine Teilnahme am Abschlusstreffen in Hannover vom 13. Bis 14 September geplant. Zu letzterem werden von F. Becker und V. Metz einige Beiträge als Vorträge und Poster erstellt, die auf der Abschlussveranstaltung präsentiert werden sollen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- Becker, F.; Berg, M. (2024) Ungewissheiten und Narrative im Kontext der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle – eine schwierige Beziehung? In: *Entscheidungen in die weite Zukunft: Ungewissheiten bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle*. Hrsg.: A. Eckhardt, 361–382, Springer Fachmedien, [doi:10.1007/978-3-658-42698-9\\_17](https://doi.org/10.1007/978-3-658-42698-9_17)
- Eckhardt, A.; Becker, F.; Mintzlauff, V.; Scheer, D.; Seidl, R. (2024) Das Unbekannte vorausdenken: Entscheidungen unter Ungewissheit und zum Umgang mit Ungewissheiten  
In: *Entscheidungen in die weite Zukunft: Ungewissheiten bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle*. Hrsg.: A. Eckhardt, 383–403, Springer Fachmedien Wiesbaden. [doi:10.1007/978-3-658-42698-9\\_18](https://doi.org/10.1007/978-3-658-42698-9_18)
- Seidl, R.; Becker, F.; Eckhardt, A.; Mintzlauff, V.; Scheer, D. (2024) Die Vielfalt der Ungewissheit bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle. In: *Entscheidungen in die weite Zukunft: Ungewissheiten bei der Entsorgung*

hochradioaktiver Abfälle. Hrsg.: A. Eckhardt, 1–12, Springer Fachmedien  
Wiesbaden. [doi:10.1007/978-3-658-42698-9\\_1](https://doi.org/10.1007/978-3-658-42698-9_1)

- Scheer, D.; Becker, F.; Hassel, T.; Hocke, P.; Leusmann, T.; Metz, V.  
(2024) Trittsicherheit auf Zukunftspfaden? Ungewissheitsbewältigung bei der  
Entsorgung hochradioaktiver Abfälle. In: Entscheidungen in die weite Zukunft:  
Ungewissheiten bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle. Hrsg.: A. Eckhardt,  
113–140, Springer Fachmedien, Wiesbaden. [doi:10.1007/978-3-658-42698-9\\_7](https://doi.org/10.1007/978-3-658-42698-9_7)
- Eckhardt, A.; Becker, F.; Mintzlaff, V.; Scheer, D.; Seidl, R., Hrsg., (2024)  
Entscheidungen in die weite Zukunft: Ungewissheiten bei der Entsorgung  
hochradioaktiver Abfälle. Springer Fachmedien Wiesbaden. [doi:10.1007/978-3-658-42698-9](https://doi.org/10.1007/978-3-658-42698-9)

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe)		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11849E</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt E		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> D2.1 Long-Term Governance D2.3 Multi-kriterielle Entscheidungsprozesse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 31.03.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 2.720.831,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> apl. Prof. Dr. Ulrich Smeddinck	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland geforscht werden. Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Die ITAS-Schwerpunkte liegen im TAP HAFF und im TAP DIPRO. Wir leisten Grundlagenforschung zu Fragen der Reversibilität und des gesellschaftlichen Dialogs, die im deutschen Standortauswahlverfahren eine besondere Rolle spielen.

TAP HAFF: „HAndlungsFähigkeit und Flexibilität in einem reversiblen Verfahren“ mit den Themen Pfadabhängigkeit als Risiko und Herausforderung, Raumwirkungen vor dem Hintergrund von Endlager-Governance sowie technische und verfahrenstechnische Komponenten von Entsorgungspfaden und deren Nebenfolgen.

TAP DIPRO: „Dialoge und Prozessgestaltung in Wechselwirkung von Recht, Gerechtigkeit und Governance“, mit dem Thema Gerechtigkeit als Ausgangspunkt. Gerechtigkeitsfragen haben insbesondere bei Projekten wie der Standortsuche und der Realisierung eines Endlagers einen hohen gesellschaftlichen Stellenwert.

Zusammenarbeit im Forschungsverbund:

Mit dem TAP SAFE wird empirisch kooperiert.

Ebenso kooperiert ITAS im Rahmen der Transdisziplinaritätsforschung mit den TD-Experten innerhalb des Forschungsverbundes (I-TD und BegleitTeam.TD).

ITAS ist im Sprecherteam des Forschungsverbundes ebenso vertreten wie in der I-TD (2 Mitarbeiter). TAP HAFF und TAP DIPRO werden jeweils durch einen ITAS-Mitarbeiter geleitet.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

TAP HAFF: Die Ergebnisse des Design-Thinking-Workshops „Nukleare Entsorgung – mögliche Wege, richtungsweisende Entscheidungen, zukünftige Herausforderungen“ (2023) wurden ausgewertet, verschriftet und in Vorträgen präsentiert. Diese Ergebnisse wurden auch in Berlin beim TRANSENS Arbeitstreffen 2024 präsentiert (Enderle, S.; Bechthold, E.; Hocke, P. 2024). Zusätzlich wird ein Buchbeitrag im TRANSENS-Sammelband „Transdisziplinäre Ansätze in der nuklearen Entsorgungsforschung“ fertiggestellt, der diesen Sommer erscheint. Ein weiterer Forschungsbericht zu den Ergebnissen des Design-Thinking-Workshops wird aktuell als Veröffentlichung vorbereitet. Der Sammelband „Entscheidungen für die Zukunft“ (Hg. A. Eckhard et al.) mit Beiträgen von Grunwald, Hocke, Kirchhof, Scheer und Smeddinck ist erschienen.

Bei der Auseinandersetzung mit dem zentralen HAFF-Thema stellte sich heraus, dass das Konzept kollaborative Kooperation und der Bedeutungshorizont des gesetzlichen Auftrags „lernendes Verfahren“ von besonderer Bedeutung sind. Teilnehmende Beobachtungen dazu wurden durchgeführt; die empirischen Auswertungen und die konzeptionelle Weiterentwicklung sind angelaufen.

Ein zentraler Schwerpunkt liegt aktuell auf dem Zusammenführen der interdisziplinären und disziplinären der ITAS-TRANSENS-Arbeiten sowie der Einordnung der transdisziplinären Ergebnisse aus HAFF. Insgesamt steht dabei die Zusammenschau aller ITAS-Ergebnisse im HAFF-Zusammenhang im Vordergrund.

TAP DIPRO:

Im Zuge der Beschäftigung mit dem lernenden Standortauswahlverfahren wurde ein weiterer Workshop mit den zentralen Akteuren durchgeführt.

Die Kommentierung des Standortauswahlgesetz, 2. Aufl., wurde weiterbearbeitet und steht vor dem Abschluss. Von externen Autor:innen sind fast alle Texte zum 30.6.24 eingegangen. Der Sammelband zur Standortvereinbarung wurde organisatorisch und gestalterisch zur Weiterleitung an den Verlag vorbereitet.

Ein Akzent wurde noch auf die Ausgestaltung der Regionalkonferenzen anlässlich der Tage der Standortauswahl gesetzt.

TAP EDU: Fortführung des ITAS-Textseminars zu einschlägiger Forschungsliteratur, in dem sowohl transdisziplinäre Themen aufgegriffen als auch durch interdisziplinäres Vorgehen neue Wissensbestände für HAFF und DIPRO erschlossen werden. Zusätzlich wurde je 1 Vortrag zum Thema Recht und einer zu Governance in der IRS-Ringvorlesung Hannover gehalten.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

TAP HAFF:

- Vorbereitung der ITAS-Ergebnispräsentation TRANSENS-intern sowie für die Abschlusskonferenz mit ihrem Bürgertag.
- Fortführen und Planung der Weiterbildungsaktivitäten zum Thema „TA und Governance im selbstlernenden Verfahren“ sowie dialogische Beratungen zu den Themen eines „lernenden Verfahrens“.

TAP DIPRO: Um die Neuauflage des Kommentars zum Standortauswahlgesetz in der verbleibenden Zeit von TRANSENS zu erreichen, bedarf es noch ergänzender Bearbeitung von Texten zweier externer Autoren. Außerdem müssen vor der Übersendung an den Verlag umfangreiche redaktionelle Arbeiten und Arbeiten am Layout erfolgen. Redaktionelle Endarbeiten sind auch noch am Sammelband zur Standortvereinbarung notwendig.

## 5. Berichte, Veröffentlichungen

Eckhardt, A.; Becker, F.; Mintzlaff, V.; Scheer, D.; Seidl, R. (2024): Das Unbekannte vorausdenken: Entscheidungen unter Ungewissheit und zum Umgang mit Ungewissheiten ,in: A. Eckhardt, F. Becker, V. Mintzlaff, D. Scheer, R. Seidl (Hg.), Entscheidungen in die weite Zukunft: Ungewissheiten bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle, Wiesbaden, S. 383–403, doi:10.1007/978-3-658-42698-9\_18.

Eckhardt, A.; Becker, F.; Mintzlaff, V.; Scheer, D.; Seidl, R. (Hrsg.) (2024): Entscheidungen in die weite Zukunft: Ungewissheiten bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle, doi:10.1007/978-3-658-42698-9.

Grunwald, A. (2024): Offene Zukunft und unsicheres Zukunftswissen: die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle, in: A. Eckhardt, F. Becker, V. Mintzlaff, D. Scheer, R. Seidl (Hg.), Entscheidungen in die weite Zukunft: Ungewissheiten bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle, Wiesbaden, S. 13–30.

Kirchhoff, A. (2024): Atomkraft und Endlagerung: Von der parallelen Existenz von (Un-) Gewissheiten in Politik und Zivilgesellschaft seit dem Zweiten Weltkrieg, in: A. Eckhardt, F. Becker, V. Mintzlaff, D. Scheer, R. Seidl (Hg.), Entscheidungen in die weite Zukunft: Ungewissheiten bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle, Wiesbaden, S. 93–112.

Mbah, M.; Kuppler, S. (2024): Governing Nuclear Waste in the Long Term: On the Role of Place, *Historical Social Research*, 49 (1), 193–226, doi:10.12759/hsr.49.2024.09.

Oppen, A. v.; Smeddinck, U. (2024): Über Geld spricht man nicht. Doch! Aber wann und wie? – Ein Beitrag aus Sicht einer Bürgerin und eines Wissenschaftlers, in: M. C. Müller (Hg.), Die Suche nach einem Lager für hochradioaktive Abfälle – In der Schweiz und in Deutschland, *Loccumer Protokolle Band 26/2022*, Rehburg-Loccum, S. 65–74.

Ossenberg, C. (2024): Die Regionalkonferenzen nach § 10 StandAG – Die innere Organisation als Herausforderung für regionale Diskussionsräume? in: K.-J. Röhlig (Hg.), *Tagungsband – 4. Tage der Standortauswahl 18./19. April 2024 in Goslar, Clausthal-Zellerfeld*, S. 41–42.

Scheer, D.; Becker, F.; Hassel, T.; Hocke, P.; Leusmann, T.; Metz, V. (2024): Trittsicherheit auf Zukunftspfaden? Ungewissheitsbewältigung bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in: A. Eckhardt, F. Becker, V. Mintzlaff, D. Scheer, R. Seidl (Hg.), Entscheidungen in die weite Zukunft: Ungewissheiten bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle, Wiesbaden, S. 113–140, Wiesbaden, doi:10.1007/978-3-658-42698-9\_7.

Seidl, R.; Becker, F.; Eckhardt, A.; Mintzlaff, V.; Scheer, D. (2024): Die Vielfalt der Ungewissheit bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle, Entscheidungen in die weite Zukunft: Ungewissheiten bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle, in: A. Eckhardt, F. Becker, V. Mintzlaff, D. Scheer, R. Seidl (Hg.), Entscheidungen in die weite Zukunft: Ungewissheiten bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle, Wiesbaden, S. 1–12, doi:10.1007/978-3-658-42698-9\_1.

Smeddinck, U.; Berg, M. (2024): Ein Querschnitt durch die Forschung des transdisziplinären Arbeitspakets DIPRO, *TRANSENS-Bericht Nr. 12*, Karlsruhe, Kiel, DOI:10.21268/20231205-0.

Smeddinck, U. (2024): Ungewissheit als Regulierungsaufgabe des Standortauswahlgesetzes – Von der Gefahrenabwehr zur Vorsorge für 1 Million Jahre, in: A. Eckhardt, F. Becker, V. Mintzlaff, D. Scheer, R. Seidl (Hg.), Entscheidungen in die weite Zukunft: Ungewissheiten bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle, Wiesbaden, S. 167–186, doi.org/10.1007/978-3-658-42698-9\_9.

Smeddinck, U. (2024): Zwischen TD-Management und TD-Forschung – das lernende Standortauswahlverfahren als Beispiel, in: U. Smeddinck, M. Berg (Hg.), Ein Querschnitt durch die Forschung im transdisziplinären Arbeitspaket DIPRO – Inhalte und Reflektionen, *TRANSENS-Bericht Nr. 12*, Karlsruhe, Kiel, S. 10–15, DOI:10.21268/20231205-0.

## Vorträge

Enderle, S.; Bechthold, E.; Hocke, P. (2024). Zur Problemwahrnehmung und Lösungsfindung von Praxisakteuren des Standortauswahlverfahrens – Ergebnisse eines kollaborativen Experiments, TRANSENS-Arbeitstreffen, Berlin, 28. Februar 2024.

Hocke, P. (2024): Der Leuchtturm Asse mit schwacher öffentlicher Beleuchtung. Endlagertagung Loccum, 15. Juni 2024.

Hocke, P. (2024): Stand des Lernenden Standortauswahlverfahrens aus Sicht der Technikfolgenabschätzung, 3. ITAS-DAEF-Workshop zum „Lernenden Verfahren“, Berlin, 16. Februar 2024.

Kuppler, S.; Bechthold, E. (2024): Infrastrukturkonflikte verstehen und bearbeiten. Hinweise aus dem Konfliktfeld Entsorgung hochradioaktiver Abfälle, Tagung des DGS-Arbeitskreises „Soziologie der Nachhaltigkeit“ (SONA) und der DGS-Sektion Umwelt- und Nachhaltigkeitssoziologie „Infrastrukturtransformationen angesichts multipler Krisen“, Stuttgart, 6. Juni 2024.

Kuppler, S.; Hocke, P. (2024): Endlager-Governance und ihre komplexen Randbedingungen. Ringvorlesung Kernenergie und Brennstoffkreislauf, Hannover, 22. April 2024.

Kuppler, S. (2024): Schweiz. Zwischen direkter Demokratie und Handlungsnotwendigkeiten. Vortrag im Rahmen der NBG-Reihe „Endlager international“, Online, 3. Juni 2024.

Ossenberg, C. (2024): Die Regionalkonferenzen nach § 10 StandAG – Die innere Organisation als Herausforderung für regionale Diskussionsräume? Goslar, 18. April 2024.

Smeddinck, U. (2024): (zusammen mit Thomas Hassel, Margarita Berg): DIPRO-(Reflexions-) Workshop F – Unsere Arbeit an Ergebnissen als Beispiel, TRANSENS-Arbeitstreffen Berlin, 16. Februar 2024.

Smeddinck, U. (2024): Standortauswahlgesetz und Öffentlichkeitsbeteiligung, Vortrag im Rahmen der Ringvorlesung „Kernenergie und Brennstoffkreislauf, technischer Aspekte und gesellschaftlicher Diskurs“, Institut für Radioökologie und Strahlenschutz, Universität Hannover, 29. April 2024.

Smeddinck, U. (2024): Grundgesetz und Standortauswahlgesetz, Impulsvortrag anlässlich der „Dialogrunde zu „Endlagersuche und Grundgesetz“ des Bundesumweltministeriums, Bürgerfest „Demokratie feiern! Das Grundgesetz wird 75 – gemeinsam wird’s ein Fest“, Berlin, 25. Mai 2024.

Smeddinck, U. (2024): Impuls zu Kompensationen bei Zwischenlagern für Atommüll, Planungsforum Endlager, online, 21. Juni 2024.

Smeddinck, U. (2024): Zwischen Konsens und Entschleunigung? Die Öffentlichkeitsbeteiligung im Standortauswahlgesetz, Vortrag im Rahmen des Seminars "Modernes Regieren und Politikmanagement", Institut für Politikwissenschaft, Technische Universität Kaiserslautern-Landau, Landau, 25. Juni 2024.

Smeddinck, U. (2024): Co-evolutive Politikberatung und Normbildung für das „lernende“ Standortauswahlverfahren für ein Endlager hochradioaktiver Abfälle, Vortrag im Rahmen der Tagung „Normenbildung in der Energiewende“, Technische Universität Berlin, Institut für Soziologie, 28. Juni 2024.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11849F</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt F		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> D2.1 Long-Term Governance		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 3.473.288,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Walther	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt. LUH IRS/IW und ETH Zürich tragen zu allen vier TAP bei: Flexibilität statt linearer Ablauf des Verfahrens: schrittweises Vorgehen, Haltepunkte im Verfahrensablauf, die Option von begründeten Rückschritten und die Reaktion auf neue Forschungsergebnisse sind die Themen der transdisziplinären Forschung im TAP HAFF. Dialog und Diskurs sind Schlüssel zur Verständigung. Wie muss der langwierige Prozess gestaltet werden, um dafür gute Bedingungen auf dem Entsorgungspfad zu schaffen? Das ist Gegenstand der transdisziplinären Forschung im TAP DIPRO. In einem Verfahren, das die Rückholung eingelagerter Abfälle im Falle einer ungünstigen Entwicklung des Lagers vorsieht, muss man sich frühzeitig Gedanken machen über Monitoring-Strategien, Entscheidungswege, Entscheidungsträger und Verantwortlichkeiten. Dies ist Gegenstand des TAP TRUST. Im TAP SAFE wird transdisziplinär untersucht, ob und inwieweit Sichtweisen von Nicht-Spezialisten nahelegen, das Konzept des Safety Case anzupassen oder weiterzuentwickeln, um so die Diskurs- und Beratungsfähigkeit zu verbessern.

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

#### IRS:

TAP TRUST: Modul 1: Übergreifender Rahmen des TAP TRUST und Leitung der AGBe  
Modul 2: Transdisziplinäre Erarbeitung eines Programms zur Umweltüberwachung  
TAP SAFE: Modul 6: Die Rolle der radioökologischen Modellierung im Safety Case  
EDU: Aus- und Weiterbildung

#### IW:

TAP HAFF: Modul 1: Pfadabhängigkeit als Risiko und Herausforderung  
Modul 2: Raumwirkungen und Governance  
Modul 3: Konzeptionelle Grundlagen und Basisinformationen  
TAP DIPRO: Workshop D: Darstellung technischer Randbedingungen  
Workshop F: Transdisciplinarity meets reality – Lessons learned

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

IRS: TAP TRUST (Modul 1): Es wurden qualitative Interviews mit zwölf AGBe-Mitgliedern geführt. Zudem wurde mit Modul 3 und risicare ein Workshop zu den Themen „Wirkung des Endlagers im Raum unter Tage“ und Bürgergutachten“ organisiert. Für die *4. Tage der Standortauswahl* wurden ein Vortrag zur Zusammenarbeit mit der AGBe und ein Poster zum Thema Vertrauen, Risiko und Fairness bei der Endlagerung erarbeitet. Mit Modul 3 wurde ein weiterer Vortrag auf der *SRA-Europe Conference Risk in Time And Space* in Athen gehalten. Ein Paper über Fairness, Sicherheit und Akzeptanz und Berichte zu Vertrauen bzw. die Workshops sind in Arbeit.

- TAP TRUST (Modul 2): Gemeinsam mit Bürger\*innen wurde eine Reihe öffentlicher Veranstaltungen zum Thema Bürgerbeteiligung bei der Endlagersuche umgesetzt. Des Weiteren wurde ein Bericht über die Messungen von Tritium und Kohlenstoff-14 in Umweltproben an der Asse veröffentlicht. Die Ergebnisse der Zusammenarbeit wurden auf öffentlichen Veranstaltungen gemeinsam reflektiert. Zudem wurden 15 Schulbesuche durchgeführt.

- TAP SAFE (Modul 6): Die Selen-Batchversuche wurden ausgewertet und entsprechende Modellrechnungen durchgeführt. Erste Säulenversuche wurden begonnen. Gemeinsam mit der TUC wurde an der weiteren Verarbeitung der Ergebnisse des AGBe Workshops "Indikatoren und Modellrechnung" für die *4. Tage der Standortauswahl* und den SAFE-Abschlussworkshop gearbeitet.

- EDU: Für die Abschlussveranstaltung wurde ein Programm zum Einbezug von Fachöffentlichkeit und interessierte Bevölkerung unter Einbezug aller Projektpartner erarbeitet. Die Ringvorlesung wurde fortgesetzt.

- IW: TAP HAFF: Gemeinsam mit KIT-INE, TUB-iBMB und ÖT wurden Arbeiten zu Entsorgungspfaden sowie mit INE zu einer konkretisierten Beschreibung des Pfades der direkten Endlagerung von **TLB** fortgeführt. Hierzu erfolgte u.a. eine Betrachtung der Endlagerfähigkeit der Castorbehälterfamilie insbesondere dahingehend, ob es CASTOR-Varianten gibt, welche die Möglichkeit der direkten Einlagerung bieten könnten.

- IW: TAP DIPRO: Im Rahmen der TD-Taskforce wurde mit der DIPRO-Begleitgruppe gearbeitet. Zur Ergebniskonsolidierung wurden Ergebnisse des Workshops F in Zusammenarbeit mit KIT-ITAS und CAU-Kiel ausgewertet. Es erfolgte eine inhaltliche Berichterstattung zu den Auswertungen und Ergebnissen im Rahmen des TRANSENS-Arbeitstreffens in Berlin, wobei eine Gesamtschau der DIPRO-Ergebnisse stattfand. Zudem wurde eine Ergebnisschau der disziplinären, inter- und transdisziplinären Ergebnisse des Team LUH-IW vorgenommen.

-

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- IRS: TAP TRUST (Modul 1): Die Arbeiten für den Workshop-Bericht werden fortgesetzt. Weitere Vorarbeiten für die Beteiligung an der TRANSENS-Abschlussveranstaltung sowie zukünftige Fachveröffentlichungen laufen.

- TAP TRUST (Modul 2): Die Ergebnisse des Projektes werden in einem Bericht zusammengefasst und veröffentlicht. Hierauf aufbauend werden Vorschläge für zukünftige Konzepte zur Einbindung von Bevölkerung im Rahmen einer Wissenschaft/Bürger\*innen-Kollaboration an einem Standort für radioaktive Abfälle erarbeitet.

- TAP SAFE (Modul 6): Da die bisherigen Modellrechnungen nicht gut zu den Ergebnissen der Batchversuche passen, ist eine vertiefte Überprüfung der Modellannahmen und eine Reevaluation der bestehenden Validierungsstudie notwendig. Die Säulenversuche sollen fortgesetzt und ausgewertet werden. Ferner sollen weiterführende Modellrechnungen durchgeführt werden. Auf der Jahrestagung der "International Radiation Protection Association" wird das Webtool zur Biosphärenmodellierung präsentiert.

- (EDU): Die Ringvorlesung wird fortgeführt. Im Rahmen der zweitägigen Abschlussveranstaltung werden diverse Informationsangebote für interessierte Bürger\*innen und die Fachöffentlichkeit organisiert.

IW: TAP HAFF: Fortsetzung der Textarbeit zu Erkenntnissen bezogen auf die „Castor“-Behälterfamilie zur allgemeinen Betrachtung der direkten Endlagerfähigkeit sowie Arbeit an TRANSENS-Bericht zur verlängerten Zwischenlagerung. Weitere Aufbereitung einer Wissensbasis zum Themenbereich technische Barriere zur Vorbereitung transdisziplinärer Wissensvermittlung unter dem Blickpunkt Komplexität/Vollständigkeit vs. Verständlichkeit/Vertrauen. Konkretisierung der Beschreibungen zu den Pfadabhängigkeiten.  
 -TAP DIPRO: Weitere Textarbeit zur Darstellung der Vorbereitung, Durchführung und Auswertung der Arbeiten im Workshop D und F sowie Arbeit an der Abschlussberichterstattung und Vorbereitung der Abschlusskonferenz.

## 5. Berichte, Veröffentlichungen

U.a.:

(1) Seidl, R., Drögemüller, C. (2024). Vertrauen, Risiko und Fairness bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle, in: Röhlig, K.-J. (Hrsg., 2024): 4. Tage der Standortauswahl 18./19.04.2024 in Goslar, Tagungsband, 48-49, DOI: 10.21268/20240416-I

(2) Heiermann, M., Drögemüller, C., Kogiomtzidis, A., Seidl, R. (Hrsg.) (im Entstehen): Transdisziplinäre Ansätze in der nuklearen Entsorgung. Erfahrungen und Reflexionen aus dem Projekt TRANSENS. TRANSENS-Bericht

Drögemüller, C., Schulz, W., Seid, R., Walther, C. (im Entstehen): Basis für Vertrauen in Wissenschaft beim Thema Entsorgung radioaktiver Abfälle, Proceedings der 5. INSIST-Nachwuchstagung, 6.-7.10.2022, **Berlin**

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Öko-Institut e. V., Rheinstraße 95, 64295 Darmstadt		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11849G</b>
<b>Vorhabenbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt G		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> D2.1 Long-Term Governance C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 505.379,00 EUR	<b>Projektleiterin:</b> Julia Neles	

## 1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit wird planvoll in Forschungskontexte, konkret in vier Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Weitere Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt. Die Expertise des Öko-Instituts wird insbesondere in die TAPs HAFF und SAFE einbezogen.

Das TAP HAFF fokussiert auf die Flexibilität des Verfahrens, die statt eines linearen Ablaufs, ein schrittweises Vorgehen ermöglicht, das Haltepunkte im Ablauf und die Option von Rücksprüngen sowie die Reaktion auf neue Forschungsergebnisse vorsieht. Das TAP SAFE fokussiert u.a. auf Fragen der Kommunikation und des Umgangs mit Ungewissheiten im Rahmen des Safety Case (SC). Dabei wird transdisziplinär untersucht, ob und inwieweit Sichtweisen von Nicht-Spezialisten nahelegen, das Konzept des SC anzupassen oder weiterzuentwickeln.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

### TAP HAFF: Handlungsfähigkeit und Flexibilität in einem reversiblen Verfahren

Das TAP gliedert sich in drei Module, an allen drei ist das Öko-Institut beteiligt, wobei Modul 2 vom Öko-Institut verantwortet wird, und beinhaltet u.a. folgende Arbeitsschritte:

a) Literaturrecherche, b) Experten-Interviews zu Raumwirkungen von kerntechnischen Entsorgungsanlagen, c) Transdisziplinärer Workshop mit Praxisakteuren zum Umgang mit räumlichen Transformationen sowie leitfadengestützte Interviews zu räumlicher Identität und Entwicklung eines raumsensiblen Longterm Governance-Konzeptes, d) Visuelles Experiment zur Wirkung von räumlichen Transformationen (Landschaftswandel) mit Praxisakteuren, e) Fokusgruppe mit Stakeholdern zur Prüfung und Weiterentwicklung der konzeptionellen Ideen, f) Analyse der Interviews zur Entwicklung partizipativer Ausgestaltungsempfehlungen; Erfahrungen aus dem Schweizer Fall, g) Synthese der Ergebnisse und Entwicklung von Handlungsempfehlungen zum Umgang mit raumzeitlichen Spezifika unter Berücksichtigung von Haltepunkten und Rücksprüngen.

### TAP SAFE: Stakeholder-Perspektiven und Transdisziplinarität

Das TAP gliedert sich in sieben Module, an vier Modulen ist das Öko-Institut beteiligt. Das Öko-Institut unterstützt mit eigenen Arbeiten den Diskurs.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Neben dem Arbeitstreffen im Februar in Berlin nahm das Öko-Institut an Treffen des TAP HAFF und des TAP SAFE sowohl in Präsenz als auch virtuell teil.

TAP HAFF: Modul 1: Aus der Bearbeitung der Thematik der Neugenehmigung von Zwischenlagern nach 40 Jahren Betriebszeit wird derzeit ein TRANSENS-Bericht mit anderen Teams erstellt, Arbeitstitel „Aspekte im Hinblick auf eine Neugenehmigung von HAA-Zwischenlagern nach 40 Jahren Betriebszeit“.

Modul 2: Derzeit ist ein TRANSENS-Bericht zu den Gesamtergebnissen des Modul 2 in Fertigstellung. Die in 2023 erarbeitete Publikation mit dem Titel „Governing Nuclear Waste in the Long Term: On the Role of Place“ ist mittlerweile in der Zeitschrift Historical Social Research erschienen. Aktuell ist eine Fokusgruppe mit (dt.) Akteuren, die im Schweizer Sachplanverfahren geologische Tiefenlager beteiligt waren in Vorbereitung, diese wird am 04.07. in Waldshut durchgeführt.

TAP SAFE: Fortsetzung der fachlichen Unterstützung der Diskussion um inter- und transdisziplinäre Formate sowie Beiträge zum Abschlussbericht des TAP SAFE; der TRANSENS Bericht „Der Safety Case in der Endlagerung als ein Beispiel für die Bedeutung von Sicherheitsmanagement und -kultur“ wurde Anfang 2024 veröffentlicht und beim Projekttreffen vorgestellt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

TAP HAFF: Die Veröffentlichung der TRANSENS-Berichte ist in ca. 3 Monaten geplant. In Modul 2 werden die Ergebnisse des Termins mit der Fokusgruppe mit Praxisakteuren ausgewertet. Zudem werden Beiträge für den Abschlussbericht und die Abschlusskonferenz vorbereitet.

TAP SAFE: Zum Abschluss der Arbeiten im TAP SAFE wird ein Abschlussdokument erstellt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Brohmann, B.; Mbah, M.; Neles, J. (2024): Der Safety Case in der Endlagerung als ein Beispiel für die Bedeutung von Sicherheitsmanagement und -kultur. Darmstadt, Freiburg TRANSENS-Bericht-14.

Gutting, Alicia; Högselius, Per; Meyer, Teva; Mbah, Melanie (2024): Geographies of Nuclear Energy. An Introduction. In: Historical Social Research 49 (1), S. 7–31.

Mbah, Melanie; Kuppler, Sophie (2024): Governing Nuclear Waste in the Long Term: On the Role of Place. In: Historical Social Research 49 (1), S. 193–226.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Technische Universität Berlin – Fachgebiet Wirtschafts – und Infrastrukturpolitik		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11849H</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: „Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt H		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> D2.1 Long-Term Governance		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 31.03.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 362.577,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Christian von Hirschhausen	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden.

Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

Dialog und Diskurs sind Schlüssel zur Verständigung. Wie muss der langwierige Prozess gestaltet werden, um dafür gute Bedingungen auf dem Entsorgungspfad zu schaffen? Das ist Gegenstand der transdisziplinären Forschung im TAP DIPRO.

Das Fachgebiet für Wirtschafts- und Infrastrukturpolitik erarbeitet im TAP DIPRO auf der Grundlage disziplinärer und interdisziplinärer Forschung eine Bewertung der volkswirtschaftlichen Vorteilhaftigkeit von Organisationsmodellen bzw. Governance-Strukturen an der Schnittstelle zwischen den Prozessen des Rückbaus, der Lagerung und der Standortsuche. Unter Berücksichtigung ingenieurwissenschaftlicher Erkenntnisse sollen mögliche Synergieeffekte und Hindernisse, die eventuell Verzögerungen oder Kostensteigerungen verursachen könnten, herausgearbeitet werden. Des Weiteren erarbeitet bzw. eruiert das Fachgebiet, basierend auf Wissen über monetäre und nicht-monetäre Anreizstrukturen in Kooperation mit anderen Partnern verschiedene Kompensationsszenarien und gesellschaftliche Möglichkeiten distributiver Gerechtigkeit im Umgang mit Lasten- und Verantwortungsverteilung.

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Arbeitsprogramm des TAP DIPRO gliedert sich in drei Module, wovon ein Modul der wissenschaftlichen Vorbereitung und ein Modul der Synthese dient. Im Zentrum steht das Praxismodul mit einer Reihe aus drei Workshops für Teilnehmer aus dem nicht-akademischen Bereich, in denen jeweils unterschiedliche Aspekte von Gerechtigkeit, Recht und Governance behandelt werden. Bei der Workshop-Organisation wechseln sich die DIPRO-Partner ab. Alle Projektpartner (im TAP DIPRO) sind bei den Workshops vertreten.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Am 22.01.2024 führten die Mitarbeiter Fabian Präger mit dem Teilnehmenden des Team der TUB mit Jonas Müller das Orientierungsgespräch „TRANSENS auf der Zielgeraden“. Dabei wurde der bisherige Verlauf in TRANSENS reflektiert sowie noch ausstehende Arbeiten erörtert und die Beiträge für die Abschlussveranstaltung besprochen.
- Fabian Präger und Prof. Dr. Christian von Hirschhausen nahmen vom 28.02.-01.03.2024 am TRANSENS-Arbeitstreffen in Berlin teil.
- Das Team der TUB hat erste Entwürfe zum Beitrag im TRANSENS-Magazin erarbeitet und übermittelt.
- Planung und Koordinierung der Fortführung der Ringvorlesung „Kernenergie und Brennstoffkreislauf“, welche auch nach dem Projektende von TRANSENS von Clemens Walther weitergeführt wird.
- Fabian Präger beteiligt sich weiterhin bei der Organisation und Betreuung der DIPRO Begleitgruppe.
- Die Mitarbeiterin Kristin Dietrich unterstützt weiter bei wissenschaftlichen Arbeiten zu Themen der Finanzierung.
- Am 27. Mai trat die neue Mitarbeiterin Julia Rechlitz nach ihrer Rückkehr aus der Elternzeit ihre neue Stelle im Projekt Transens an. Fr. Rechlitz wird die andauernden Arbeiten zur Finanzierung methodisch unterstützen.
- Am 2. AT-OM DAY Research Workshop, veranstaltet am 24. Mai an der TU Berlin, wurden einzelne Zwischenstände zu aktuell laufenden Arbeiten, insb. zur langfristigen Finanzierung der nuklearen Entsorgung, präsentiert und diskutiert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Erarbeitung der Beiträge zur Abschlussveranstaltung am 13. und 14. September 2024 in Hannover. Hier wird das Team TUB in Fachvorträgen zentrale Ergebnisse der Forschungsarbeiten vorstellen und am zweiten Tag die im Projekt entwickelten transdisziplinären Begleitprodukten der interessierten Öffentlichkeit vorstellen, um ein niederschwelliges Angebot für Dialoge zur Endlagerthematik anbieten zu können.
- Wissenschaftliche Arbeiten zum Thema der Finanzierung werden weitergeführt und zu Ende gebracht.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> TU Braunschweig, Postfach 3329, 38023 Braunschweig		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11849I</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt I		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> D2.3 Multi-kriterielle Entscheidungsprozesse C2.4 Monitoring		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 31.03.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.239.091,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr.-Ing. Stahlmann	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Im Verbundvorhaben TRANSENS wird erstmalig in Deutschland transdisziplinäre Forschung zur nuklearen Entsorgung in größerem Maßstab betrieben. Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden:

- HAFF: Handlungsfähigkeit und Flexibilität in einem reversiblen Verfahren
- SAFE: Safety Case: Stakeholder-Perspektiven und Transdisziplinarität
- TRUST: Technik, Unsicherheiten, Komplexität und Vertrauen
- DIPRO: Dialoge und Prozessgestaltung in Wechselwirkung von Recht, Gerechtigkeit und Governance

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

In einem Verfahren, das die Rückholung eingelagerter Abfälle im Falle einer ungünstigen Entwicklung des Lagers vorsieht, muss man sich frühzeitig Gedanken machen über Monitoring-Strategien, Entscheidungswege, Entscheidungsträger und Verantwortlichkeiten. Dies ist Gegenstand des TAP TRUST.

Flexibilität statt linearer Ablauf des Verfahrens: schrittweises Vorgehen, Haltepunkte im Verfahrensablauf, die Option von begründeten Rückschritten und die Reaktion auf neue Forschungsergebnisse sind die Themen der transdisziplinären Forschung im TAP HAFF.

Dialog und Diskurs sind Schlüssel zur Verständigung. Wie muss der langwierige Prozess gestaltet werden, um dafür gute Bedingungen auf dem Entsorgungspfad zu schaffen? Das ist Gegenstand der transdisziplinären Forschung im TAP DIPRO.

Das IGG der TU Braunschweig ist in TAP TRUST eingebunden und bearbeitet Fragestellungen zu Monitoring und zur Akzeptabilität von Ungewissheiten während der Beobachtungsphase und einer Rückholung.

Das iBMB der TU Braunschweig ist in den TAPs HAFF und DIPRO eingebunden und entwickelt und visualisiert dazu idealtypische Konzepte für obertägige Anlagen von Endlagern. Dabei wird der komplette Lebenszyklus der Bauwerke betrachtet. Wesentliches Element ist dabei ein lernfähiges Lebenszyklusmanagementsystem.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Arbeiten in den verschiedenen TAPs DIPRO und HAFF sowie Projekttreffen und Workshops, an denen das iBMB im Berichtszeitraum mitgearbeitet hat, werden nachfolgend ausführlich erläutert.

Das iBMB beteiligt sich am TRANSENS-Bericht mit dem Arbeitstitel „Aspekte zur Neugenehmigung von Zwischenlagern nach 40 Jahren Betriebszeit“ zusammen mit dem Ökoinstitut, KIT INW und der LU Hannover. Isabelle Scharf hat als neue Mitarbeiterin in TRANSENS die Berichterstellung übernommen.

Für das TRANSENS-Magazin wurde ein zweiseitiger Artikel erstellt, in dem auf die transdisziplinären Arbeiten in der Workshopreihe E des TAPs DIPRO zur verlängerten Zwischenlagerung sowie dem visuellen Experiment mit Fokus auf Modellierung und Oberflächendarstellung im TAP HAFF eingegangen wird. Auch das IGG hat hierfür einen Beitrag zur Thematik der Rückholung erstellt.

Am IGG liefen u.a. folgende Arbeiten: In einer Präsentation „Geotechnik, die ungewisse Herausforderung“ wurden unter anderem die Erkenntnisse zur Ungewissheit aus TRANSENS auf der Tagung „Messen in der Geotechnik“ am 22.02.2024 vorgestellt. Der Sammelband „Entscheidungen für die weite Zukunft. Ungewissheiten bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle“ wurde bei Springer VS publiziert. Das Bürgergutachten mit einem Teil der Arbeitsgruppe Bevölkerung (AGBe) und der DIPRO-Begleitgruppe wurde diskutiert und wird derzeit erarbeitet. Die Erkenntnisse aus der Zusammenarbeit mit der AGBe wurden auf der SRA-Europe-Tagung am 3.6.2024 in Athen vorgestellt. Weiterhin wurde an der Dokumentation des Projekts gearbeitet.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Beide Institute werden an der Abschlusskonferenz teilnehmen. Am Wissenschaftstag, dem 13.09.2024, ist eine Beteiligung mit Postern zum adaptiven Lebensdauermanagement von Infrastrukturen und Gebäuden am Endlagerstandort und im Kontext der verlängerten Zwischenlagerung vorgesehen. Am Tag 2 mit Öffentlichkeitsbeteiligung, dem 14.09.2024, beteiligt sich das iBMB am Marktstand zum visuellen Experiment zusammen mit dem Ökoinstitut und der Uni Kassel. Das IGG beteiligt sich mit einer Visualisierung der bei der Endlagerung relevanten Zeiträume und mit einem allgemeinverständlichen Beitrag zur Rückholung.

Das Bürgergutachten zu Entscheidungen bei der Rückholung ist derzeit in Bearbeitung. Weiterhin ist eine Publikation zu den numerischen Berechnungen zum Demonstrator Rückholung in Arbeit.

Darüber hinaus werden Publikationen und studentische Arbeiten zu den Themen Lebensdauermanagement und Dauerhaftigkeit mit dem Schwerpunkt auf Schädigungs- und Alterungsmechanismen bei Stahlbetonbauwerken sowie Rückholung und Ungewissheiten erstellt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Eckhardt, A.; Becker, F., Mintzlaff, V., Scheer, D., Seidl, R. (Hrsg.) (2024) Entscheidungen für die weite Zukunft. Ungewissheiten bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle. Springer VS, Wiesbaden.

Stahlmann, J., Mintzlaff, V. Geotechnik, die ungewisse Herausforderung. In: Stahlmann, J. et al. (Ed.), 2024. Messen in der Geotechnik 2024: Fachseminar am 22./23. Februar 2024, Mitteilung des Instituts für Geomechanik und Geotechnik. Bd. 116.

Seidl, R., Mintzlaff, V., Othmer, A. Risk evaluation regarding potential retrieval of nuclear waste. A case study with a group of german citizens. SRA-Tagung “Risk in Time and Space” in Athen, 2.-5.6.2024.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Universität Kassel, Arbeits- und Organisationspsychologie		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11849J</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt J		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> D1.1 Methoden und Instrumente des Wissens- und Kompetenzmanagements D2.2 Sicherheitskultur und Mechanismen der Fehlerkorrektur im selbst hinterfragenden System		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 31.03.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 327.569,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. habil. Oliver Sträter	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in vier Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert; spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

Im TAP HAFF soll Flexibilität statt eines linearen Ablaufs des Verfahrens erarbeitet werden durch ein schrittweises Vorgehen, mit Haltepunkten im Verfahrensablauf, der Option von begründeten Rückschritten und Reaktion auf neue Forschungsergebnisse.

Im TAP SAFE wird untersucht, ob und inwieweit Sichtweisen von Nicht-Spezialisten nahelegen, das Konzept des Safety Case anzupassen oder weiterzuentwickeln, um so die Diskurs- und Beratungsfähigkeit zu verbessern. Weiterhin wird untersucht, ob und inwieweit Sichtweisen von Nicht-Spezialisten nahelegen, das Konzept des Safety Case anzupassen oder weiterzuentwickeln, um so die Diskurs- und Beratungsfähigkeit zu verbessern.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Fachgebiet Arbeits- und Organisationspsychologie beteiligt sich insbesondere am TAP HAFF und TAP SAFE mit folgenden Arbeitspaketen:

- HAFF AP 1: Psychologische Aspekte bei der Entscheidungsfindung für Haltepunkte und Rückschritte.
- HAFF AP 2: Unterstützung des schrittweisen Verfahrens hinsichtlich einer positiven Sicherheits- und Fehlerkultur.
- HAFF AP 3: Anwendung der Methodik auf Szenarien.

sowie

- SAFE AP 1: Bestandsaufnahme ganzheitlicher, systemischer Effekte der menschlichen Zuverlässigkeit auf den Umgang mit Sicherheitsanforderungen.
- SAFE AP 2: Methode zur Berücksichtigung der Aspekte der menschlichen Zuverlässigkeit in den Einschätzungen und Bewertungen von Ungewissheiten.
- SAFE AP 3: Anwendung der Methodik auf Modellrechnungen und Ergebnisdiskussionen.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Übergeordnet: Auf dem öffentlichen Abschlusstreffen des Projektes werden die Ergebnisse des Fachgebietes in TAP HAFF und TAP SAFE gemeinschaftlich vorgestellt und ein Planspiel zum Thema „Menschliche Zuverlässigkeit“ durchgeführt werden. Dabei wird auch die Bedeutung des td-Ansatzes für die Themen von HAFF und SAFE sichtbar gemacht. Während des TRANSENS-Arbeitstreffens in Berlin am 28.02.2024 wurde der Zusammenhang in einem Vortrag vorgestellt und Projekt-intern evaluiert.

HAFF AP 1: Analyse des Zusammenhangs der Drift-into-failure Konzeptes mit Sicherheitskultur, Handlungsfähigkeit und td-Ansatz.

HAFF AP 2: TRANSENS Ringvorlesung (TAP EDU) zu den Auswirkungen von Entscheidungen auf die Sicherheitskultur der zentralen Akteure.

HAFF AP 3: Vorbereitung und Durchführung des Abschlusstreffens in Hannover mit einem Planspiel „Menschliche Zuverlässigkeit“ sowie Veröffentlichung eines Beitrages im TRANSENS-Sammelband zum Thema Faktor Mensch und Ungewissheiten (Open-Access DOI: 10.1007/978-3-658-42698-9)

SAFE AP 1: Zusammenstellung der Aspekte menschlicher Zuverlässigkeit anhand der Anforderungen aus der Synopse zu den BMU Sicherheitsanforderungen und auf Basis gesamten Vorarbeiten von SAFE AP 1 in Vorbereitung des Abschlussberichtes und weiterer Veröffentlichungen hierzu.

SAFE AP 3: Zusammenfassung der Analyse der Methodik zur Bewertung des Einflusses menschlicher Zuverlässigkeit mit Hilfe eines Fragebogeninstrumentes für Biases sowie einer wissenschaftlichen Arbeit (Bachelorarbeit) zum Thema Beeinflussung von Emotionen durch Informationen in Gruppensituationen.

SAFE AP 3: Darstellung der Anwendung von Methoden der menschlichen Zuverlässigkeit auf Fragestellungen eines Safety Cases mit Praxisakteuren und Darstellung des Bezuges zu den Methoden des td-Ansatzes.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

HAFF AP 1: Weiterentwicklung der transdisziplinären Methode mit Hilfe multimedialer Unterstützung durch den virtuellen Raum und Ausarbeitung und Anwendung entsprechender transdisziplinärer Szenarien, um die Wirksamkeit der transdisziplinären Ansätze zu erhöhen.

SAFE AP 1: Beitrag zu einem Special Issue des renommierten Journals RESS (Reliability Engineering and System Safety zu den ganzheitlichen, systemischen Effekten der menschlichen Zuverlässigkeit auf den Umgang mit Sicherheitsanforderungen in der Endlagerforschung

HAFF AP 1-3 und SAFE AP 1-3: Zusammenfassende Veröffentlichung zur Methodik zur Bewertung des Einflusses menschlicher Zuverlässigkeit bei Endlager-Fragestellungen und der Handlungsfähigkeit durch Sicherheitskultur sowie Darstellung der Themen auf dem öffentlichen TRANSENS Abschlusstreffen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Sträter, O. (2024) Menschliche Zuverlässigkeit und Sicherheitskultur im Endlagerprozess. TRANSENS Ringvorlesung. Hannover.

Othmer, A. & Muxlhanga, H., Lux, K.-H. & Sträter, O. (2024). Umgang mit Modellierungsungewissheiten. Beitrag zum TRANSENS Sammelband ‚Ungewissheiten‘.

Sträter, O. (2024) Biases, menschliche Zuverlässigkeit und TRANSENS. Vortrag zur Bedeutung von Biases in Entscheidungsfindungen. TRANSENS Projekttreffen. Berlin

Fritsch, F. & Sträter, O. (2024) Menschliche Faktoren im Prozess der Standortauswahl. Vortrag auf den Tagen der Standortauswahl in Goslar.

Fritsch, F. & Sträter, O. (2024) Human reliability in the German site selection for a nuclear waste repository. Konferenzbeitrag zur AHFE (International Conference on Applied Human Factors and Ergonomics), Nizza

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Forschungszentrum Jülich GmbH, 52425 Jülich		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 W 6279</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Neu- und Weiterentwicklung von Konzepten, Methoden und Techniken für die internationale Kernmaterialüberwachung, insbesondere im Rahmen der nuklearen Entsorgung (SAFEGUARDS-3)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> D3.1 Konzepte zur Kernmaterialüberwachung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2019 bis 31.12.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 889.554,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Irmgard Niemeyer	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Die Bundesregierung soll in ihren Bemühungen unterstützt werden, in Zusammenarbeit mit der IAEO und Euratom das Verifikationssystem zur Nichtweiterverbreitung von Kernwaffen weiterzuentwickeln. Neben der ständigen Verbesserung der Effektivität des Überwachungssystems spielen Gesichtspunkte des Kontrollaufwandes (Effizienz) eine zentrale Rolle. Dieser Aspekt hat besondere Bedeutung bei der erweiterten Aufgabenstellung der IAEO durch das Zusatzprotokoll im Hinblick auf die Entdeckung undeckelter Nuklearmaterialien und Nuklearaktivitäten.

Das Vorhaben baut auf den Ergebnissen der vorangegangenen Vorhaben 02W6184, 02W6218, 02W6232, 02W6243, 02W6259 und 02W6263 auf. Die Arbeiten haben Bezug zum BMWi-Förderkonzept „Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle - (2015-2018)“, zu den strategischen Zielen des 7. Energieforschungsprogramm der Bundesregierung (2018) im Rahmen der Entsorgungs- und Endlagerforschung, zum Nationalen Entsorgungsprogramm (2015) sowie zum BMWi-IAEA Joint Programme. Die Arbeiten werden in enger Abstimmung zwischen Regierung, den Kontrollbehörden IAEO und Euratom, Industrie sowie Forschung und Entwicklung geplant und durchgeführt.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- 6.1 Konzepte zur Kernmaterialüberwachung
  - AP 6.1.1 Safeguards-Konzepte für verlängerte Zwischenlagerzeiten
  - AP 6.1.2 Safeguards-Konzepte für unterschiedliche Endlagerkonzepte
  - AP 6.1.3 Safeguards-Konzepte für kerntechnische Anlagen im Rückbau
- 6.2 Methoden und Techniken zur Kernmaterialüberwachung
  - AP 6.2.1 Einschluss und Überwachung
  - AP 6.2.2 Erneute Behälterüberprüfung (Re-Verifikation)
  - AP 6.2.3 Methoden zur Entdeckung von unabhängigen Bergbauaktivitäten und Hohlräumen
  - AP 6.2.4 Geoinformationstechnologien
- 6.3 Kooperation, Kommunikation, Kapazitätsaufbau zur internationalen Kernmaterialüberw.
  - AP 6.3.1 Kooperation mit der Deutschen Gesellschaft für Auswärtige Politik (DGAP)
  - AP 6.3.2 Pflege des nationalen Safeguards-Internet-Portals
  - AP 6.3.3 Nationale Gremien
  - AP 6.3.4 Internationale Gremien

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP 6.1.1: Erarbeitung der konzeptionellen und technischen Anforderungen an die Safeguardsüberwachung der Zwischenlager in Deutschland bis mindestens 2050
- AP 6.1.2: Start eines Promotionsprojekts zum Einsatz eines Digitalen Zwillings im Rahmen der Safeguardsüberwachung eines HAW-Endlagers
- AP 6.1.3: Beratung von Anlagenbetreibern zur Safeguardsüberwachung von Anlagen im Rückbau
- AP 6.2.1: Keine
- AP 6.2.2: Auswertung des Feldtests zur Eignung der Myonen-Tomographie zur Re-Verifikation von Brennelementbehältern in den Zwischenlagern
- AP 6.2.3: Durchführung eines Promotionsprojekts zur multitemporalen Satellitenbildanalyse im Rahmen der Safeguardsüberwachung von kerntechnischen Anlagen
- AP 6.2.4: Keine
- AP 6.3.1: Vorbereitung eines neuen Arbeitsprogramms für die AG2N
- AP 6.3.2: Keine
- AP 6.3.3: Mitarbeit in der Arbeitsgemeinschaft Kernmaterialüberwachung (AKÜ) sowie im Arbeitskreis Spaltstoffüberwachung des vgb energy e.V.
- AP 6.3.4: ESARDA: Leitung von zwei Arbeitsgruppen und Mitarbeit in weiteren Arbeitsgruppen; Mitarbeit bei der Vorbereitung der ESARDA-Jahrestagung, Luxemburg, Mai 202. INMM: Leitung der 'International Safeguards Division'; Mitarbeit bei der Vorbereitung der INMM-Jahrestagung, Portland, Juli 2024

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP 6.1.1: Fortsetzung der o.g. Arbeiten
- AP 6.1.2: Fortsetzung der o.g. Arbeiten
- AP 6.1.3: Fortsetzung der o.g. Arbeiten
- AP 6.2.1: Keine
- AP 6.2.2: Fortsetzung der o.g. Arbeiten
- AP 6.2.3: Abschluss der o.g. Arbeiten
- AP 6.2.4: Keine
- AP 6.3.1: Fortsetzung der o.g. Arbeiten
- AP 6.3.2: Keine
- AP 6.3.3: Fortsetzung der o.g. Arbeiten
- AP 6.3.4: Fortsetzung der o.g. Arbeiten; Mitarbeit bei der Durchführung der INMM-Jahrestagung, Portland, Juli 2024

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- G. Bonomi et al., Muon Tomography for Reverification of Spent Fuel Casks (the MUTOMCA Project), *Journal of Advanced Instrumentation in Science*, vol. 2024, no. 1, Mar. 2024
- L. Laumen, I. Niemeyer, Combined U-Net and LSTM approach to detect safeguards-relevant changes in Sentinel-2 images. Proc. 56th INMM Annual Meeting, Portland/Oregon, July 2024
- J. Niedermeier et al., The MUTOMCA Project – An Overview. Proc. KERNTECHNIK 2024, Leipzig, June 2024

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> RWTH Aachen		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 W 6281	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Antineutrino-Detektion zur Überwachung radioaktiver Abfälle (NU-SAFEGUARDS)			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> D3.1 Konzepte zur Kernmaterialüberwachung D3.2 Methoden und Techniken zur Kernmaterialüberwachung			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2022 bis 30.04.2025		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2024 bis 30.06.2024	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 344.338,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Malte Götsche	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Es gibt bislang keine Techniken, um die hochradioaktiven Abfälle in Endlagern nach deren Einschluss direkt zu verifizieren. Bisherige Ansätze beruhen auf einem „black box“ Ansatz, bei dem unter Nutzung verschiedener „Containment and Surveillance“ Verfahren überprüft werden soll, dass kein Zugang zum Endlager geschaffen wird. Da einzelne Techniken jedoch ausfallen können, ist der Einsatz redundanter Verfahren notwendig. Entgegen der „black box“-Annahme gibt es durchaus Teilchen, die von den radioaktiven Abfällen emittiert werden und von Wirtsgesteinen nicht abgeschirmt werden: Antineutrinos. Diese entstehen aus Zerfallsprozessen in den Abfällen. Deren Detektion kann also Aufschluss über das Inventar geben. Auch zur Überwachung von Zwischenlagern könnte sich die Antineutrino-Detektion eignen. Wir werden mit diesem Vorhaben die erste detaillierte angewandte Studie zu Antineutrino-Monitoring als Fernüberwachungs-Tool von Endlagern durchführen. Zur Erhöhung der Redundanz von Safeguards-Maßnahmen soll dieser Ansatz darüber hinaus auch für die Überwachung von Zwischenlagern betrachtet werden. Das Ziel ist dabei, die prinzipielle Machbarkeit sowie konkrete Möglichkeiten und Grenzen entsprechender Detektionsverfahren zu erfassen.

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP1: Untersuchung verschiedener Detektortypen
- AP2: Modellierung verschiedener Endlager- und Zwischenlagerkonfigurationen
- AP3: Abschätzungen der erwarteten Signal- und Untergrundraten
- AP4: Entwicklung konkreter Detektordesigns und Auswertemethoden
- AP5: Definition konkreter Einsatzszenarien für Safeguards und Sicherheit
- AP6: Einbettung von Antineutrino-Monitoring in Safeguards-Gesamtkonzept

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

In AP4 wurden die in AP3 ermittelten Signal- und Untergrundraten für verschiedene Detektoren unter Berücksichtigung der verschiedenen technologiespezifischen Vor- und Nachteile evaluiert. Diese Analyse wurde durch die Betrachtung verschiedener detektorspezifischer Methoden zur Reduktion der Untergrundraten erweitert: Physikalische Detektorsegmentierung für Plastik- und Flüssigszintillationsdetektoren, Positionsrekonstruktion für Flüssigszintillationsdetektoren und organische Zeitprojektionskammern (LOR-TPC), sowie eine zeitenfensterbasierte Selektion basierend auf der geschätzten Zeitauflösung für alle drei untersuchten Technologien. Darauf aufbauend wurde ein Referenzdetektordesign für alle drei Technologien in einer Detektorsimulation

implementiert und die zugehörigen Untergrundraten bestimmt. Diese Referenzdesigns wurden am Beispiel der Zwischenlagerüberwachung verglichen. Diese Betrachtung der Detektionstechniken kommt zu dem vorläufigen Ergebnis, dass die Untergrundraten die Rekonstruktion deutlich beeinflussen und somit die Detektionszeit der Abzweigung einer SQ („significant quantity“) an Spaltmaterial sowie die Re-Verifikationszeit (siehe Ergebnisse im letzten Zwischenbericht) im Median um ca. 60-70% erhöhen, verglichen mit einem Detektor mit idealer Ereignisrekonstruktion. Wird zur Untergrundreduktion zusätzlich eine Richtungsrekonstruktion angewandt – nur möglich im LOr-TPC Ansatz – verbessert sich die Leistung erheblich: Eine Winkelauflösung von nur 0 Grad ermöglicht eine zeitlich angemessene Gesamtüberwachung mit ca. 10-15% erhöhter Detektionszeit und bei einer Winkelauflösung von 30 Grad ist die Detektionszeit um nur <10% erhöht mit einer Re-Verifikationszeit im Median von 2-4 Monaten, je nach genauer Konfiguration der Behälter und Detektoren.

Hieraus schließt sich, dass eine rudimentäre Richtungsrekonstruktion zur Unterdrückung von Untergrundereignissen für die Überwachung von Kernabfällen erforderlich ist, um einen signifikanten Verlust der statistischen Signifikanz bzw. eine erheblich erhöhte Detektionszeit durch den Untergrund zu vermeiden. Dies bedeutet auch, dass nach derzeitigem Kenntnisstand von den untersuchten Technologien nur die LOr-TPC-Technologie das Potenzial besitzt, eine solche Überwachung bzw. Re-Verifikation für ein Zwischenlager durchzuführen. Allerdings ist diese Technologie derzeit auch die am wenigsten ausgereifte (ca. TRL 2-3) und bedarf weiterer F&E.

Diese Ergebnisse sind in das laufende AP5 und AP6 eingeflossen: In Zusammenarbeit mit dem FZ Jülich wurden für die spezifizierten Detektorkonzepte weitere relevante Szenarien mit unterschiedlichen Diskrepanzgraden zwischen Behälterinhalt und Deklaration („gross defect“, „partial defect“ und „pin-level defect“) entwickelt sowie angemessene Konfidenzniveaus (20%/50%/70%) für die partielle Re-Verifikation und Überwachung in Kombination mit anderen Techniken bestimmt. Diese niedrigeren Konfidenzniveaus sind interessant für Szenarien, in denen die Antineutrino-Methodik ergänzend eingesetzt wird, um die langfristige Entwicklung des Inventars zu verfolgen. Ein Beispiel ist die begleitende Überwachung von Zwischenlagern während des Endlagerungsprozesses.

#### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die Arbeiten an AP4 sind größtenteils abgeschlossen und basierend auf diesen Ergebnissen wird nun eine Veröffentlichung vorbereitet, die die Detektorkonzepte darstellt und die Ergebnisse unter den verschiedenen Bedingungen analysiert, inklusive einer parametrischen Behandlung der Untergrundrate und Detektorauflösung(en). Dadurch werden für die LOr-TPC-Technologie, trotz der technischen Unreife, konkrete technische Anforderungen formuliert und die davon abhängige Eignung für die Überwachung radioaktiver Abfälle dargestellt. Die Veröffentlichung ist im nächsten Berichtszeitraum geplant. Im Rahmen einer Masterarbeit wird zusätzlich die Eignung eines LOr-TPC-Detektors zur Myonenanalyse untersucht, als Zuarbeit für AP6. Auch diese wird in nächsten Berichtszeitraum abgeschlossen und entsprechend präsentiert.

Im Rahmen eines Unterauftrags wurden die AP4 Ergebnisse, sowie die sich in Arbeit befindlichen AP5 Ergebnisse vom FZ Jülich betrachtet, mit regelmäßigem Informationsaustausch. Diese Diskussionen fließen bereits in die nun laufenden Arbeiten an AP5 und AP6 ein.

## **5. Berichte, Veröffentlichungen**

### Vorträge:

Y. Schnellbach, "Antineutrino-based Safeguards for the Monitoring of Spent Nuclear Fuel".  
Vortrag bei der DPG Frühjahrstagung (20.03.2023).

### Berichte & Studienarbeiten:

Keine

### Veröffentlichungen:

Keine

## **Information zu Publikationen sowie zu Aus- und Weiterbildung**

In den Halbjahresberichten werden in kurzgefasster Form die Ergebnisse der aktuell bewilligten Forschungsvorhaben dargestellt. Vorhabenrelevante Publikationen werden aufgelistet, soweit es der Platz zulässt; es ist aber nicht immer möglich, alle im Rahmen eines FuE-Vorhabens erfolgten Veröffentlichungen (schriftlich oder mündlich) aufzunehmen. Ferner sind Informationen zur Aus- und Weiterbildung wissenschaftlichen Nachwuchses bei den Forschungseinrichtungen nicht explizit abgefragt und ausgewiesen worden.

Es wurde daher beginnend mit dem Jahr 2015 vereinbart, zukünftig Angaben zur Gesamtzahl der Publikationen und zu Ausbildungsaspekten zu machen. Die entsprechenden Daten werden von den Forschungseinrichtungen zur Verfügung gestellt.

Die zusammenfassende Darstellung erfolgt im jeweils zweiten Halbjahresbericht eines Kalenderjahres. Damit soll zusätzlich zur Kurzdarstellung der Vorhabenergebnisse in den Fortschrittsberichten dokumentiert werden, dass und wie die FuE-Ergebnisse verbreitet werden.

### **Publikationen**

Im Jahr 2023 erfolgten in rund 135 Veröffentlichungen in begutachteten Journalen, in Form von Schlussberichten, Doktor-, Master-, Bachelor- und Studienarbeiten oder in sonstiger schriftlicher Form die Publikation von Ergebnissen von FuE-Vorhaben durch die geförderten Forschungseinrichtungen.

Zudem wurden im Jahr 2023 rund 187 Vorträge auf Konferenzen, bei Workshops und sonstigen Veranstaltungen gehalten und Ergebnisse bzw. Zwischenergebnisse präsentiert.

### **Aus- und Weiterbildung**

Ein strategisches Forschungsziel der BMUV-Förderung ist die Bereitstellung von Expertise und Wissen, der Erhalt und Ausbau wissenschaftlich-technischer Kompetenz und als wichtiges Element dafür die Unterstützung und Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses.

Die Aus- und Weiterbildung von Post-Docs, Doktoranden, Masterstudenten erfolgt nahezu ausschließlich durch Universitäten und Einrichtungen der Helmholtz Gemeinschaft. Gleichwohl erfolgt in einzelnen Fällen die Ausbildung und Finanzierung wissenschaftlichen Nachwuchses im Rahmen einer wissenschaftlichen Kooperation zwischen Universitäten und Unternehmen.

Im Jahr 2023 waren in den hier aufgeführten FuE-Vorhaben 84 Nachwuchswissenschaftlerinnen und Nachwuchswissenschaftler in FuE-Vorhaben eingebunden.

### 3 Verzeichnis der Forschungsstellen

#### BGE TECHNOLOGY GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine

- 02 E 11577A** Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt A  19
- 02 E 11890A** Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt A  64
- 02 E 11971B** Verbundprojekt: Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschmelzen für Verschlussmaßnahmen von Endlagern für radioaktiver Abfälle im Wirtsgestein Salz (SalVE), Teilprojekt B  84
- 02 E 12042A** Verbundprojekt: Erarbeitung einer Methodik zur systematischen Ableitung von zu erwartenden und abweichenden Entwicklungen im Kristallingestein in Deutschland und exemplarische Anwendung als Grundlage zur Bewertung des sicheren Einschlusses unter Berücksichtigung von Optimierungsmaßnahmen (CHRISTA III), Teilpr. A  109
- 02 E 12133A** Verbundprojekt: Weiterführung der Entwicklung von Ausbau von Grubenbauen für ein HAW-Endlager in Tongestein (AGEnT002), Teilprojekt A  144

#### Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Christian-Albrecht-Platz 4, 24118 Kiel

- 02 E 11849B** Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt B  169

#### DMT GmbH & Co. KG, Am TÜV 1, 45307 Essen

- 02 E 12133B** Verbundprojekt: Weiterführung der Entwicklung von Ausbau von Grubenbauen für ein HAW-Endlager in Tongestein (AGEnT002), Teilprojekt B  146

#### Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich

- 02 E 11921A** Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEParation von AMericiuM aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt A  72
- 02 W 6279** Neu- und Weiterentwicklung von Konzepten, Methoden und Techniken für die internationale Kernmaterialüberwachung, insbesondere im Rahmen der nuklearen Entsorgung (SAFEGUARDS-3)  192

#### Freie Universität Berlin, Kaiserwerther Str. 16-18, 14195 Berlin

- 02 E 11849C** Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt C  172

**Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena**

- 02 E 11911B** Verbundprojekt: Vorhersage der heterogenen Radionuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in granitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt B  70
- 02 E 12153A** Verbundprojekt: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern (EVIDENT), Teilprojekt A  150

**Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Schwertnergasse 1, 50667 Köln**

- 02 E 11466** Entwicklung von Rechenmodulen für die integrierte Modellierung von Transportprozessen im einschlusswirksamen Gebirgsbereich (RepoTREND+)  17
- 02 E 11577B** Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt B  21
- 02 E 11627** Arteigene Versatz- und Verschlussmaterialien für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Tonformationen (AVET)  23
- 02 E 11668A** Verbundprojekt: Smart-K<sub>d</sub> in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (SMILE), Teilprojekt A  25
- 02 E 11698** Untersuchung thermisch-hydraulisch-mechanisch-chemischer Einwirkungen auf zementbasierte Dichtelemente (THYMECZ)  27
- 02 E 11819** Mineralumwandlung und Sorption bei erhöhten Temperaturen in geklüfteten Kristallingesteinen und Barrierematerial (MUSE)  29
- 02 E 11829** Tonsteinforschung im Felslabor Mont Terri ab Phase 25 (MonTe-25)  31
- 02 E 11870A** Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt A  50
- 02 E 11880** Sicherheitsrelevante Untersuchungen zur Bentonitaufsättigung (SIRUB)  62
- 02 E 11941** Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern (WiGru-9)  79
- 02 E 11981A** Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt A  86

- 02 E 12012A** Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d<sup>3f++</sup>: Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE II), Teilprojekt A  98
- 02 E 12022B** Verbundprojekt: Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH<sup>2</sup>M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen - Erweiterung auf multiphysikalische Ansätze und mehrdimensionale Modellgeometrien (BenVaSim II), Teilprojekt B  105
- 02 E 12032** Methoden zur experimentellen und numerischen Analyse der geologischen Barriere eines Endlagers in tonreichen Sedimentgesteinsformationen (MAGNUS)  107
- 02 E 12042B** Verbundprojekt: Erarbeitung einer Methodik zur systematischen Ableitung von zu erwartenden und abweichenden Entwicklungen im Kristallingestein in Deutschland und exemplarische Anwendung als Grundlage zur Bewertung des sicheren Einschlusses unter Berücksichtigung von Optimierungsmaßnahmen (CHRISTA III), Teilpr. B  111
- 02 E 12052B** Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt B  115
- 02 E 12122A** Verbundprojekt: Stabilität von Mineralphasen des Eisens im Nahfeld eines Endlagers (STAMINA), Teilprojekt A  140
- 02 E 12153C** Verbundprojekt: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern (EVIDENT), Teilprojekt C  154
- 02 E 12163B** Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt B  158

**Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstraße 400, 01328 Dresden**

- 02 E 11860B** Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt B  35
- 02 E 11870B** Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt B  52
- 02 E 11911A** Verbundprojekt: Vorhersage der heterogenen Radionuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in granitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt A  68
- 02 E 12052A** Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt A  113

- 02 E 12072B** Verbundprojekt: MgO-Beton C3 als langzeitbeständiges und schnellwirksames Verschlusselement für Schachtverschlüsse zukünftiger HAW-Endlager im Salinar (MgO-C3), Teilprojekt B  127
- 02 E 12112A** Verbundprojekt: Systematic sensitivity analysis for mechanistic geochemical models using field data from crystalline rock (SANGUR), Teilprojekt A  136

**Helmholtz-Zentrum Potsdam Deutsches GeoForschungsZentrum GFZ, Telegrafenberg, 14473 Potsdam**

- 02 E 12062B** Verbundprojekt: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe), Teilprojekt B: Bayesischer Ansatz zur Kalibrierung geomechanisch-numerischer Modelle mit Reduzierung von Ungewissheiten  121

**Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstraße 21, 55122 Mainz**

- 02 E 11860A** Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt A  33

**Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main, Senckenberganlage 31, 60325 Frankfurt am Main**

- 02 E 12012B** Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d<sup>3f++</sup>: Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE II), Teilprojekt B  100

**Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen**

- 02 E 11849D** Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt D  174
- 02 E 11849E** Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt E  177
- 02 E 11860C** Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt C  37
- 02 E 11921B** Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEParation von AMeridium aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt B  74
- 02 E 11981B** Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt B  88
- 02 E 12052C** Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt C  117

- 02 E 12122B** Verbundprojekt: Stabilität von Mineralphasen des Eisens im Nahfeld eines Endlagers (STAMINA), Teilprojekt B  142
- 02 E 12153B** Verbundprojekt: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern (EVIDENT), Teilprojekt B  152

**Karlsruher Institut für Technologie (Universitätsaufgabe), Kaiserstr. 12, 76131 Karlsruhe**

- 02 E 12001A** Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH-SP1), Teilprojekt A  94
- 02 E 12163A** Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt A  156

**Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover**

- 02 E 11849F** Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt F  181
- 02 E 11870E** Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt E  58
- 02 E 11870F** Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt F  60
- 02 E 11981C** Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt C  90
- 02 E 12092** Recherche und Beschreibung für das Endlagerbehältersystem in Frage kommende Materialien (ElaBeMa)  131

**Öko-Institut. Institut für angewandte Ökologie e. V., Merzhauser Str. 173, 79100 Freiburg**

- 02 E 11849G** Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt G  184

**Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, Templergraben 55, 52062 Aachen**

- 02 E 11931** Einfluss der thermischen Reife auf die gekoppelten hydro-mechanischen Eigenschaften niedrig-durchlässiger Tonsteine – Feld & Laborskala (Maturity)  76
- 02 E 12062C** Verbundprojekt: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe), Teilprojekt C: Ungewissheiten durch geometrische Parameter, Erstellung  123

von Ersatzmodellen durch Methoden der künstlichen Intelligenz

**02 W 6281** Antineutrino-Detektion zur Überwachung radioaktiver Abfälle (NU-SAFEGUARDS)  194

**Ruhr-Universität Bochum, Universitätsstr. 150, 44801 Bochum**

**02 E 12001B** Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH-SP1), Teilprojekt B  96

**Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestraße 6, 09599 Freiberg**

**02 E 11890B** Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt B  66

**02 E 11971A** Verbundprojekt: Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschmelzen für Verschlussmaßnahmen von Endlagern für radioaktiver Abfälle im Wirtsgestein Salz (SaLVE), Teilprojekt A  82

**02 E 12072A** Verbundprojekt: MgO-Beton C3 als langzeitbeständiges und schnellwirksames Verschlusselement für Schachtverschlüsse zukünftiger HAW-Endlager im Salinar (MgO-C3), Teilprojekt A  125

**02 E 12143** Feinerkundung der Steinsalzkontur im Bereich zukünftiger Verschlussbauwerke in HAW-Endlagern durch in situ Raman-Spektroskopie (SaRa)  148

**02 E 12163C** Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt C  160

**02 E 12173** Entwicklung eines salzgrusbasierten Versatzkonzepts unter der Option Rückholbarkeit - Phase 2 (SAVER II)  162

**Technische Universität Berlin, Straße des 17. Juni 135, 10623 Berlin**

**02 E 11849H** Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt H  186

**Technische Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig, Pockelsstr. 14, 38106 Braunschweig**

**02 E 11849I** Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt I  188

**02 E 12102** Entwicklung einer selbstlernenden Modellierungsmethodik zu geomechanischen und geotechnischen Prozessen am  133

Beispiel der Planungs- und Auffahrungsphase einer  
Einlagerungsstrecke eines Tiefenlagers (SEMOTI)

**Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Straße 2A,  
38678 Clausthal-Zellerfeld**

- |                    |  |       |
|--------------------|--|-------|
| <b>02 E 11849A</b> | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt A   | 📖 165 |
| <b>02 E 11991</b>  | Entwicklung und Validation einer neuartigen Versuchstechnik für triaxiale Kriechversuche bei geringer deviatorischer Belastung (KRIECHTECH)  | 📖 92  |
| <b>02 E 12022A</b> | Verbundprojekt: Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH <sup>2</sup> M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen - Erweiterung auf multiphysikalische Ansätze und mehrdimensionale Modellgeometrien (BenVaSim II), Teilprojekt A | 📖 103 |
| <b>02 E 12082</b>  | Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken - Durchführung, Auswertung und Reanalyse von THM-Versuchen unter triaxialer Extensionsbeanspruchung (SSBVIER)   | 📖 129 |
| <b>02 E 12112B</b> | Verbundprojekt: Systematic sensitivity analysis for mechanistic geochemical models using field data from crystalline rock (SANGUR), Teilprojekt B  | 📖 138 |

**Technische Universität Darmstadt, Karolinenplatz 5, 64289 Darmstadt**

- |                    |   |       |
|--------------------|---|-------|
| <b>02 E 12062A</b> | Verbundprojekt: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe), Teilprojekt A: Ungewissheiten durch Materialparameter, Diskretisierung, Initial- und Randbedingungen | 📖 119 |
|--------------------|---|-------|

**Technische Universität Dresden, Helmholtzstr. 10, 01069 Dresden**

- |                    |  |      |
|--------------------|--|------|
| <b>02 E 11860G</b> | Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt G | 📖 46 |
|--------------------|--|------|

**Technische Universität München, Arcisstraße 21, 80333 München**

- |                    |  |      |
|--------------------|--|------|
| <b>02 E 11860E</b> | Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt E | 📖 42 |
| <b>02 E 11870D</b> | Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt D                     | 📖 56 |

**Universität des Saarlandes, Campus, 66123 Saarland**

- |                    |  |      |
|--------------------|--|------|
| <b>02 E 11860D</b> | Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt D | 📖 39 |
|--------------------|--|------|

**Universität Greifswald, Domstr. 11, 17489 Greifswald**

**02 E 11870C** Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt C  54

**Universität Heidelberg, Grabengasse 1, 69117 Heidelberg**

**02 E 11860H** Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt H  48

**Universität Kassel, Mönchebergstr. 19, 34125 Kassel**

**02 E 11849J** Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt J  190

**Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam**

**02 E 11860F** Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt F  44